



École Polytechnique



CEA



Università di Trento

Thèse de doctorat en cotutelle entre
l'**École Polytechnique** et l'**Università di Trento**
Organisme d'accueil : **CEA de Saclay**

**Étude d'un modèle fin de
changement de phase liquide-vapeur**
Contribution à l'étude de la crise d'ébullition

Gloria FACCANONI

Soutenue le 21 novembre 2008 à Palaiseau pour obtenir le grade de
Docteur de l'École Polytechnique, Spécialité : Mathématiques Appliquées
et de
Dottore di Ricerca in Matematica dell'Università di Trento

Directeurs de thèse : Grégoire ALLAIRE
Eleuterio TORO

Encadrant CEA : Samuel KOKH

Rapporteurs : Rémi ABGRALL

Philippe HELLUY

Jean-Marc HÉRARD

Autres membres du jury : François BOUCHUT

Frédéric COQUEL

Vincent GIOVANGIGLI

Gloria FACCANONI

<mailto:gloria@cmap.polytechnique.fr>

<http://www.cmap.polytechnique.fr/~gloria/>

Remerciements

Cette thèse n'aurait pas pu aboutir sans la présence de nombreuses personnes que je tiens à remercier ici.

*En tout premier lieu j'exprime toute ma reconnaissance envers M. **Grégoire ALLAIRE**, professeur à l'École Polytechnique, qui a assuré la direction scientifique de cette thèse avec beaucoup de patience et de gentillesse. Je le remercie tout particulièrement pour la confiance qu'il m'a accordée dès mon arrivée en France et pour l'opportunité qu'il m'a offerte en me proposant ce sujet de recherche très motivant. Je lui suis reconnaissante pour son intérêt constant pour le sujet ainsi que pour la totale liberté de réflexion qu'il m'a laissée, pour ses conseils, sa disponibilité (malgré son emploi du temps très chargé il a toujours trouvé du temps à m'accorder). Il a su me faire profiter de sa grande culture mathématique, de son expérience et de sa grande compétence. Je le remercie également pour sa sympathie et ses grandes qualités humaines sachant toujours me remotiver quand cela était indispensable. Je le remercie infiniment et j'espère que nous aurons l'occasion de travailler à nouveau ensemble.*

*Je remercie chaleureusement M. **Samuel KOKH**, ingénieur-chercheur au CEA, qui a assuré l'encadrement de ce travail, pour sa confiance sans cesse renouvelée. Je le remercie pour tout ce qu'il m'a appris concernant les changements de phase et les méthodes numériques et pour l'aide scientifique et informatique qu'il m'a apportée ainsi que pour ses encouragements.*

*Je remercie M. **Eleuterio TORO** pour la confiance qu'il m'a témoigné en acceptant cette responsabilité de cotutelle entre l'Università di Trento et l'École Polytechnique.*

*J'exprime toute ma reconnaissance envers M. **Rémi ABGRALL**, M. **Philippe HELLUY** et M. **Jean-Marc HÉRARD** qui m'ont fait l'honneur de consacrer un temps précieux à la lecture de ce manuscrit. Merci pour vos remarques avisées et pour l'intérêt que vous avez porté à mon travail (ainsi que pour les précieuses corrections de français).*

*Je remercie M. **François BOUCHUT**, M. **Frédéric COQUEL** et M. **Vincent GIOVANGIGLI** qui m'ont fait l'honneur de faire partie de mon jury de soutenance.*

*Je tiens à remercier les différents organismes ayant participé à cette thèse : l'**Università di Trento**, l'**École Polytechnique** ainsi que le **CEA** pour m'avoir accueillie et offert des conditions de travail des plus agréables au cours de ces années de thèse.*

L'essentiel de ce travail s'est déroulé sur le centre CEA de Saclay. Je remercie chaleureusement **tous les membres du LETR** qui ont contribué, par leur sympathie et la bonne ambiance qu'ils ont apportée, à rendre plus qu'agréable mon séjour au CEA. J'ai passé trois années très riches humainement et scientifiquement. Ce laboratoire offre à une jeune doctorante de nombreuses possibilités de discussions (officielles ou devant une tasse de café) sur la quasi-totalité des sujets scientifiques qu'elle peut être amenée à aborder durant sa thèse.

Un grand merci donc aux membres du Laboratoire LETR du CEA ainsi qu'aux membres du **LSET** avec qui j'ai passé dans la bonne humeur ces quelques années. Je remercie aussi **Daniel CARUGE**, chef du Service des Fluides numériques Modélisation et Études au CEA et **Jacques SEGRÉ**, conseiller scientifique du service, pour les conseils et le suivi avec grand enthousiasme de l'avancement du travail.

Ici, je souhaite remercier mes amis (et collègues doctorants au CEA) qui ont fait de la période de thèse une vraie expérience de vie. Ils savent que je ne suis pas très douée pour les discours (ok, c'est un euphémisme), mais je tiens à remercier de tout mon cœur, en parfait ordre alphabétique : **Benjamin**, pour son amitié, son écoute et son aide durant l'horrible période de fin de thèse ; **Cécile**, pour ses encouragements et parce qu'elle m'a donné plus qu'elle ne pense (courage, toi aussi tu vas terminer vite) ; **Floraine**, qui vient de commencer mais que j'ai eu le plaisir de côtoyer pendant son stage ; **Marie**, parce qu'elle me fait rire et qu'elle est comme elle est, tout simplement ; **Nadia**, synonyme de «maman» ; **Thierry**, notre Scout invétéré et vrai connaisseur en café ; **Thomas**, avec qui j'ai partagé 3 ans dans le même bureau minuscule sans jamais un seul problème ; **Yohan** pour son humour et sa bonne humeur incomparables et qui, avec Benjamin, a participé avec courage à la relecture d'une partie de ce manuscrit et pour finir **Anouar**, qui n'a jamais fait de thèse mais c'est tout comme. À vous tous un énorme, immense, géant GRAZIE.

Je remercie aussi **Bérénice** pour sa chaleureuse compagnie lors de mes «vacances».¹

Je tiens aussi à remercier tous les membres des départements de **Matematica** et d'**Ingegneria** de l'Università di Trento et du **CMAF** à l'Ecole Polytechnique, qui m'ont accueilli en début et en fin de thèse, pour les bons moments que nous avons partagé. Je tiens particulièrement à remercier Karima, Julien, Seraphin, Kautar, Galena, Any, Michela, Serena, Federica, Sara, Erica. Je vous remercie très sincèrement pour la bonne ambiance et les moments inoubliables passés ensemble.

Enfin je termine ces remerciements en ayant une pensée pour **ma famille** et mon entourage proche qui ont toujours fait preuve d'un soutien infaillible à mon égard. Un merci particulier à **Jean-Paul**, pour lequel je suis venue en France et qui a dû me supporter pendant tout ces 4 ans. Je remercie aussi sa famille qui m'a généreusement accueillie dès mon arrivée.

¹... synonyme des congrès CANUM et SMAI ☺

Table des matières

<i>Remerciements</i>	<i>iii</i>
<i>Table des matières</i>	<i>v</i>
<i>Table des figures</i>	<i>xi</i>
<i>Liste des tableaux</i>	<i>xvii</i>
<i>Nomenclature</i>	<i>xix</i>
<i>1 Introduction</i>	<i>1</i>
1.1 Contexte industriel	2
1.1.1 Schéma de principe d'une centrale nucléaire à eau sous pression	3
1.1.2 Circuit primaire	5
1.2 Crise d'ébullition.	7
1.3 Simulation numérique : un outil de modélisation	10
1.3.1 Simulation numérique directe (SND)	11
1.4 Modélisation	12
1.4.1 Interfaces diffuses et loi de fermeture	13
1.4.2 Loi d'état de changement de phase	15
1.4.3 Propriétés mathématiques	16
1.5 Méthode numérique	16
1.5.1 Approche par relaxation	17
1.5.2 Schéma	17
1.5.3 Simulations	18
1.6 Plan de la thèse	21

PARTIE I

Modélisation du changement de phase

2	<i>Loi d'état du changement de phase</i>	27
2.1	Lois de comportement et hypothèses	28
2.1.1	Définition de loi d'état pour une phase pure	28
2.1.2	Courbe de coexistence et relation de Clapeyron	32
2.1.3	Transitions de phase liquide-vapeur	34
2.2	Loi d'état en transition de phase	35
2.2.1	Loi d'état sans changement de phase	35
2.2.2	Loi d'état avec changement de phase : problème d'optimisation	39
2.2.3	Conditions de compatibilité	47
2.2.4	Loi d'état avec changement de phase : enveloppe concave	49
2.3	Conclusion	54
	Annexes	57
2.A	Lien avec le modèle de Van des Waals	57
2.A.1	Équation d'état	57
2.B	Transformée de Legendre-Fenchel	63
2.B.1	Principaux potentiels thermodynamiques	67
3	<i>Écoulements en transition de phase</i>	77
3.1	Introduction	78
3.2	Système des équations d'Euler	79
3.2.1	Hyperbolicité	83
3.3	Lien entre $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$ et $(\tau, s) \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$	86
3.4	Quantités adimensionnées	88
3.5	Étude préliminaire	91
3.5.1	Équation d'une courbe isentrope	92
3.5.2	Étude de sa dérivée première et lien avec la vitesse du son	93
3.5.3	Étude de sa dérivée seconde et lien avec la dérivée fondamentale	95
3.6	Étude à la traversée des courbes de saturation	97
3.6.1	Vitesse du son	97
3.6.2	Isentropes	101
3.6.3	Dôme de saturation et point critique	103
3.6.4	Isothermes	106
3.7	Conclusion	107
	Annexes	109
3.A	Dérivée fondamentale et modèle de Van der Waals.	109
4	<i>Quelques observations sur le problème de Riemann</i>	113
4.1	Généralités sur le problème de Riemann	113

4.2	Problème de Riemann dans une zone homogène	114
4.2.1	Nature des champs caractéristiques	115
4.2.2	Existence et unicité des solutions du problème de Riemann	116
4.3	Problème de Riemann avec changement de phase	118
4.3.1	Existence et unicité des solutions du problème de Riemann	119
4.4	Conclusion	120

5 *Gaz Parfaits* **121**

5.1	Introduction	122
5.2	Notations et position du problème	123
5.3	Loi d'état de changement de phase.	128
5.3.1	Courbe de coexistence	132
5.3.2	Propriété de la loi de changement de phase	134
5.4	Hydrodynamique	143
5.5	Conclusion	145
	Annexes	145
5.A	Cas limites avec l'équation des gaz parfaits.	145
5.A.1	Calcul de la loi de changement de phase	146
5.A.2	Propriétés de la loi de changement de phase	149
5.B	Récapitulatif pour les gaz parfaits	154

6 *Stiffened Gas* **159**

6.1	Loi d'état d'une phase pure	160
6.2	Loi de changement de phase	163
6.3	Cas simplifié : $q_{liq} = q_{vap} = 0$	165
6.3.1	Loi de changement de phase	165
6.4	Cas général.	170
6.4.1	Loi de changement de phase	170
6.5	Vitesse du son	172
6.6	Dérivée fondamentale	174
6.7	Premier exemple : eau liquide et vapeur d'eau	176
6.7.1	Courbe de coexistence	176
6.7.2	Loi de changement de phase	177
6.7.3	Vitesse du son et dérivée fondamentale	181
6.8	Deuxième exemple : dodécane	185
6.8.1	Courbe de coexistence	185
6.9	Conclusion	186
	Annexes	186
6.A	Calcul des paramètres à partir de données expérimentales	186
6.B	Comparaison avec les données expérimentales pour l'eau	189

7 *Lois Tabulées* 195

7.1 Loi de changement de phase	195
7.1.1 Approximation	197
7.1.2 Choix des fonctions approximantes	198
7.2 Premier exemple : cas de l'eau	199
7.3 Deuxième exemple : cas du dodécane	203
7.4 Conclusion	206
Annexes	207
7.A Données expérimentales	207

PARTIE II

Approximation numérique

8 *Approche par relaxation instantanée* 225

8.1 Construction du sur-système HRM	227
8.1.1 Hypothèses générales de modélisation	228
8.1.2 Minimisation de l'action hamiltonienne	228
8.1.3 Choix d'une énergie interne	237
8.1.4 Structure dissipative	238
8.1.5 Nature et propriétés du système HRM à six équations	240
8.2 Dérivation d'autres sur-systèmes	244
8.2.1 Nature et propriétés du système à cinq équations avec fermeture isotherme	246
8.3 Couple HRM/HEM retenu	250
8.4 Schémas numériques basés sur le système HRM.	251
8.5 Conclusion	252

9 *Schéma numérique* 253

9.1 Schéma	257
9.2 Étape 1 : résolution du sur-système sans les termes de relaxation	261
9.2.1 Étape 1.A : Advection	261
9.2.2 Étape 1.B : Diffusion de la chaleur	270
9.2.3 Étape 1.C : Gravité	275
9.2.4 Étape 1.D : Capillarité	276
9.3 Étape 2 : projection sur la variété d'équilibre	278
9.4 Conclusion	279

10 *Simulations numériques* 281

10.1 Simulations numériques unidimensionnelles	282
10.1.1 Advection d'une interface entre phases pures à l'équilibre	282

10.1.2	Changement de phase par compression	288
10.1.3	Compression d'une bulle unidimensionnelle de vapeur	297
10.2	Simulations numériques bidimensionnelles	304
10.2.1	Compression d'une bulle de vapeur	304
10.2.2	Compression de quatre bulles de vapeur	309
10.2.3	Dépression de neuf bulles de vapeur	313
10.2.4	Surchauffage d'une bulle de vapeur dans du liquide	316
10.2.5	Nucléation d'une bulle de vapeur à contact d'une paroi chauffée	322
10.2.6	Nucléation de bulles de vapeur à contact d'une paroi chauffée	331
10.2.7	Création d'un film de vapeur	345
10.3	Conclusion	359

11 Conclusion générale et perspectives **361**

Bibliographie **369**

PARTIE III

Publications

I	<i>A strictly hyperbolic equilibrium phase transition model</i>	379
II	<i>Numerical Simulation with Finite Volume of Dynamic Liquid-Vapor Phase Tran-</i> <i>sition</i>	385

PARTIE IV

Riassunto (in italiano)

<i>Studio di un modello fine di cambiamento di fase liquido-</i> <i>vapore.</i>	
<i>Contribuzione allo studio della crisi d'ebollizione.</i>	395

Table des figures

1 Introduction

1.1	Schéma de principe d'une centrale nucléaire avec réacteur à eau sous pression (REP).	4
1.2	Schéma du cœur d'un REP	6
1.3	Endommagement par «isolation» de la paroi chaude du liquide de refroidissement (expérience OMEGA, CEA)	8
1.4	Crise d'ébullition : passage de l'ébullition nucléée à l'ébullition en film à contact d'une paroi chauffée	9

2 Loi d'état du changement de phase

2.1	Coupes de la surface S	30
2.2	Diagramme de phase	32
2.3	Courbes de coexistence et de saturation	33
2.4	Isothermes et courbe de coexistence	34
2.5	Récapitulatif	48
2.6	Plan bitangent	50
2.7	Construction géométrique de l'entropie à l'équilibre	51
2.8	Condition de compatibilité 2.5 à la page 49	52
2.9	Unicité du segment τ_{12}	53
2.10	Metastabilité	56
2.11	Isothermes du modèle de Van der Waals	58
2.12	Modèle de Van der Waals	59
2.13	Loi d'état de Van der Waals : dôme de saturation et construction de Maxwell	60
2.14	Loi de Van der Waals et correction de Maxwell : synthèse	62
2.15	Construction géométrique de la transformée de Legendre	65
2.16	Carré thermodynamique	72

3 Écoulements en transition de phase

3.1	Isentropes $\tau \mapsto P _s$ à la traversée de la courbe de saturation	102
3.2	Isentrope $\tau \mapsto P _s$	103

3.3	Courbes isentropes et pente de la courbe de saturation	104
3.4	Perte de convexité des isothermes et des isentropes à la traversée de la courbe de saturation	108
3.5	Modèle de Van der Waals : zone de perte de convexité des isentropes et zone spinodale	111

5 Gaz Parfaits

5.1	Étude des fonctions $T \mapsto f$ et $T \mapsto \tilde{f}$ sous conditions CC (5.6) et CA (5.7) . .	131
5.2	Étude des fonctions $T \mapsto f$ et $T \mapsto \tilde{f}$ sous condition CC (5.6) avec violation de la condition CA (5.7)	132
5.3	Courbe de coexistence $T \mapsto P^{\text{sat}}$	133
5.4	Dôme de saturation : courbe d'ébullition et courbe de rosée	135
5.5	Représentation de l'isotherme $T = 300 \text{ K}$ dans le plan (τ, P)	136
5.6	Vitesse du son $(y, T) \mapsto c^*$ en fonction de la fraction de masse y le long de l'isotherme $T = 400 \text{ K}$	141
5.7	Vitesse du son $(\tau, T) \mapsto c^*$ en fonction du volume molaire τ le long de l'isotherme $T = 400 \text{ K}$	142

6 Stiffened Gas

6.1	Courbes de coexistence exacte $T \mapsto P^{\text{sat}}$ et approchée $T \mapsto \hat{P}^{\text{sat}}$ et estimation des erreurs	178
6.2	Dôme de saturation en échelle logarithmique	179
6.3	Vitesse du son $(\tau, T) \mapsto c^* _T$ le long de trois isothermes	182
6.4	Vitesse du son $(y, T) \mapsto c^* _T$ le long de l'isotherme $T = 600 \text{ K}$	183
6.5	Dérivée fondamentale	184
6.6	Courbe de coexistence $T \mapsto P^{\text{sat}}$: loi stiffened vs données expérimentales .	190
6.7	Volume du liquide à saturation $T \mapsto \tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}$: loi stiffened vs données expérimentales	192
6.8	Énergie du liquide à saturation $T \mapsto \varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}$: loi stiffened vs données expérimentales	192
6.9	Enthalpie du liquide à saturation $T \mapsto h_{\text{liq}}^{\text{sat}}$: loi stiffened vs données expérimentales	192
6.10	Volume de la vapeur à saturation $T \mapsto \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}$: loi stiffened vs données expérimentales	193
6.11	Énergie de la vapeur à saturation $T \mapsto \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}$: loi stiffened vs données expérimentales	193
6.12	Enthalpie de la vapeur à saturation $T \mapsto h_{\text{vap}}^{\text{sat}}$: loi stiffened vs données expérimentales	193

7 Lois Tabulées

7.1	Comparaisons entre les fonctions approximantes et les valeurs expérimentales pour l'eau	201
-----	---	-----

7.2	Comparaisons entre les fonctions approximantes et les valeurs expérimentales pour le dodécane	205
7.3	Propriétés de l'eau à saturation	214
7.4	Propriétés du dodécane à saturation	222

8 Approche par relaxation instantanée

8.1	Famille de transformations $\hat{\chi}$	230
8.2	Couple HRM-HEM retenu.	250

9 Schéma numérique

9.1	Reformulation de la tension de surface en une force volumique	255
9.2	Schéma de résolution par décomposition d'opérateurs avec relaxation instantanée.	260
9.3	Reconstruction des pentes	266
9.4	Numérotation des mailles pour les conditions aux limites : premier et deuxième ordre	268
9.5	Discretisation de la diffusion de la chaleur	272
9.6	Notation pour l'approximation de la tension de surface	276

10 Simulations numériques

10.1	Géométrie du cas test «Advection d'une interface entre phases pures à l'équilibre»	283
10.2	Évolution en temps de la solution du cas test «Advection d'une interface entre phases pures à l'équilibre»	285
10.3	Évolution en temps de la solution du cas test «Advection d'une interface entre phases pures à l'équilibre»	286
10.4	Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test «Advection d'une interface entre phases pures à l'équilibre»	287
10.5	Géométrie du cas test «Changement de phase par compression»	288
10.6	Évolution en temps de la solution du cas test «Changement de phase par compression»	290
10.7	Évolution en temps de la solution du cas test «Changement de phase par compression»	291
10.8	Comparaison des solutions du cas test «Changement de phase par compression» à $t = 4$ ms pour 250, 500 et 1000 mailles	293
10.9	Comparaison des solutions du cas test «Changement de phase par compression» à $t = 4$ ms pour 250, 500 et 1000 mailles.	294
10.10	Comparaison des solutions du cas test «Changement de phase par compression» pour Δt donné par la condition CFL (10.1) et pour Δt donné par la condition CFL (10.2)	296
10.11	Géométrie du cas test «Compression d'une bulle unidimensionnelle de vapeur»	297

10.12	Évolution en temps du profil de la fraction de masse y pour le cas test «Compression d'une bulle unidimensionnelle de vapeur»	298
10.13	Évolution en temps du profil de la fraction de volume z pour le cas test «Compression d'une bulle unidimensionnelle de vapeur»	299
10.14	Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test «Compression d'une bulle unidimensionnelle de vapeur»	300
10.15	Évolution en temps du profil de la vitesse u pour le cas test «Compression d'une bulle unidimensionnelle de vapeur»	301
10.16	Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test «Compression d'une bulle unidimensionnelle de vapeur»	302
10.17	Évolution en temps du profil de la température T pour le cas test «Compression d'une bulle unidimensionnelle de vapeur»	303
10.18	Géométrie du cas test «Compression d'une bulle de vapeur»	305
10.19	Évolution en temps du profil de la fraction de masse y du cas test «Compression d'une bulle de vapeur»	306
10.20	Évolution en temps du profil de la densité ρ du cas test «Compression d'une bulle de vapeur»	307
10.21	Évolution en temps du profil de la pression P du cas test «Compression d'une bulle de vapeur»	308
10.22	Géométrie du cas test «Compression de quatre bulles de vapeur»	309
10.23	Évolution en temps du profil de la fraction de masse y pour le cas test «Compression de quatre bulles de vapeur»	310
10.24	Évolution en temps du profil de la fraction volumique z pour le cas test «Compression de quatre bulles de vapeur»	310
10.25	Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test «Compression de quatre bulles de vapeur»	311
10.26	Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test «Compression de quatre bulles de vapeur»	311
10.27	Évolution en temps du profil de la température T pour le cas test «Compression de quatre bulles de vapeur»	312
10.28	Géométrie du cas test «Dépression de neuf bulles de vapeur»	313
10.29	Évolution en temps du profil de la fraction volumique z pour le cas test «Dépression de neuf bulles de vapeur»	314
10.30	Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test «Dépression de neuf bulles de vapeur»	314
10.31	Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test «Dépression de neuf bulles de vapeur»	315
10.32	Évolution en temps du profil de la température T pour le cas test «Dépression de neuf bulles de vapeur»	315
10.33	Géométrie du cas test «Surchauffage d'une bulle de vapeur dans du liquide»	316

10.34	Comparaison des profils de la fraction volumique z obtenus sans et avec changement de phase pour le cas test «Surchauffage d'une bulle de vapeur dans du liquide»	317
10.35	Comparaison des profils de la fraction de masse y obtenus sans et avec changement de phase pour le cas test «Surchauffage d'une bulle de vapeur dans du liquide»	318
10.36	Comparaison des profils de la densité ρ obtenus sans et avec changement de phase pour le cas test «Surchauffage d'une bulle de vapeur dans du liquide»	319
10.37	Comparaison des profils de la pression P obtenus sans et avec changement de phase pour le cas test «Surchauffage d'une bulle de vapeur dans du liquide»	320
10.38	Comparaison des profils de la température T obtenus sans et avec changement de phase pour le cas test «Surchauffage d'une bulle de vapeur dans du liquide»	321
10.39	Géométrie du cas test «Nucléation d'une bulle de vapeur à contact d'une paroi chauffée»	322
10.40	Profil de la température $T(x_1, x_2)$ imposée au niveau de la paroi $x_2 = 0$ pour le cas test «Nucléation d'une bulle de vapeur à contact d'une paroi chauffée»	323
10.41	Condition initiale : pression hydrostatique isotherme pour le cas test «Nucléation d'une bulle de vapeur à contact d'une paroi chauffée»	324
10.42	Évolution en temps du profil de la fraction volumique z pour le cas test «Nucléation d'une bulle de vapeur à contact d'une paroi chauffée»	326
10.43	Évolution en temps du profil de la fraction de masse y pour le cas test «Nucléation d'une bulle de vapeur à contact d'une paroi chauffée»	327
10.44	Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test «Nucléation d'une bulle de vapeur à contact d'une paroi chauffée»	328
10.45	Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test «Nucléation d'une bulle de vapeur à contact d'une paroi chauffée»	329
10.46	Évolution en temps du profil de la température T pour le cas test «Nucléation d'une bulle de vapeur à contact d'une paroi chauffée»	330
10.47	Géométrie du cas test «Nucléation de bulles de vapeur à contact d'une paroi chauffée»	331
10.48	Profil de la température $T(x, y)$ imposée au niveau de la paroi $y = 0$ pour le cas test «Nucléation de bulles de vapeur à contact d'une paroi chauffée»	332
10.49	Évolution en temps du profil de la fraction volumique z pour le cas test «Nucléation de bulles de vapeur à contact d'une paroi chauffée»	334
10.50	Évolution en temps du profil de la fraction de masse y pour le cas test «Nucléation de bulles de vapeur à contact d'une paroi chauffée»	335
10.51	Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test «Nucléation de bulles de vapeur à contact d'une paroi chauffée»	336

10.52	Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test «Nucléation de bulles de vapeur à contact d'une paroi chauffée»	337
10.53	Évolution en temps du profil de la température T pour le cas test «Nucléation de bulles de vapeur à contact d'une paroi chauffée»	338
10.54	Évolution en temps du profil de la fraction volumique z pour le cas test «Influence de la tension de surface»	340
10.55	Évolution en temps du profil de la fraction de masse y pour le cas test «Influence de la tension de surface»	341
10.56	Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test «Influence de la tension de surface»	342
10.57	Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test «Influence de la tension de surface»	343
10.58	Évolution en temps du profil de la température T pour le cas test «Influence de la tension de surface»	344
10.59	Géométrie du cas test «Création d'un film de vapeur»	345
10.60	Profil de la température $T(x, y)$ imposée au niveau de la paroi $y = 0$ pour le cas test «Création d'un film de vapeur»	346
10.61	Évolution en temps du profil de la fraction volumique z pour le cas test «Création d'un film de vapeur»	348
10.62	Évolution en temps du profil de la fraction de masse y pour le cas test «Création d'un film de vapeur»	349
10.63	Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test «Création d'un film de vapeur»	350
10.64	Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test «Création d'un film de vapeur»	351
10.65	Évolution en temps du profil de la température T pour le cas test «Création d'un film de vapeur»	352
10.66	Géométrie du cas test «Création d'un film de vapeur»	353
10.67	Évolution en temps du profil de la fraction volumique z pour le cas test «Influence de la vitesse horizontale»	354
10.68	Évolution en temps du profil de la fraction de masse y pour le cas test «Influence de la vitesse horizontale»	355
10.69	Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test «Influence de la vitesse horizontale»	356
10.70	Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test «Influence de la vitesse horizontale»	357
10.71	Évolution en temps du profil de la température T pour le cas test «Influence de la vitesse horizontale»	358

Liste des tableaux

2 Loi d'état du changement de phase

2.1 Potentiels thermodynamiques et relations de Maxwell	73
---	----

5 Gaz Parfaits

5.1 Paramètres des lois d'état des figures 5.3 à la page 133 5.4 à la page 135 et 5.5 à la page 136. Ils respectent les conditions CC (5.6) et CA (5.7)	133
5.2 Paramètres des lois d'état des figures 5.6 à la page 141 et 5.7 à la page 142 .	141

6 Stiffened Gas

6.1 Paramètres d'un fluide virtuel et de sa vapeur pour une loi d'état de type <i>Stiffened Gas</i> simplifiée – exemple 1	168
6.2 Paramètres d'un fluide virtuel et de sa vapeur pour une loi d'état de type <i>Stiffened Gas</i> simplifiée – exemple 2	169
6.3 Paramètres de l'eau et de sa vapeur pour une loi d'état de type <i>Stiffened Gas</i>	176
6.4 Paramètres du dodécane et de sa vapeur pour une loi d'état de type <i>Stiffened Gas</i>	185

7 Lois Tabulées

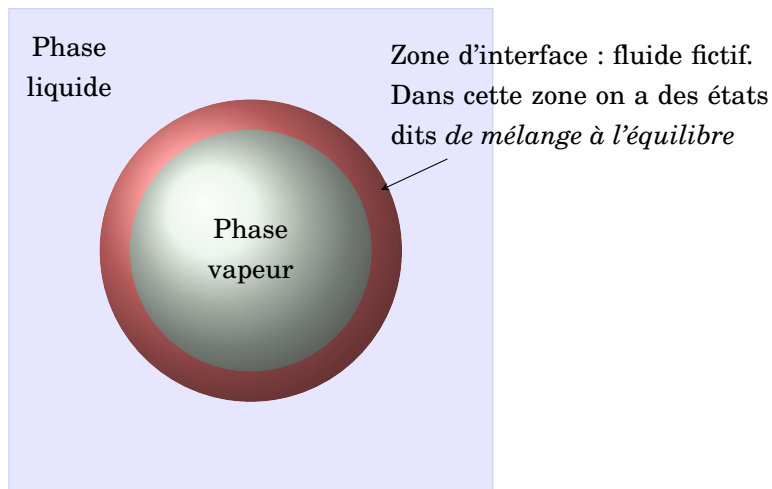
7.1 Coefficients des fonctions p_j , $j = \mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \mathfrak{C}, \mathfrak{D}$, pour l'eau et sa vapeur	200
7.2 Erreurs commises en utilisant les fonctions p_j au lieu des valeurs f_j des tables pour l'eau et sa vapeur	200
7.3 Coefficients des fonctions p_j , $j = \mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \mathfrak{C}, \mathfrak{D}$, pour le dodécane et sa vapeur . .	204
7.4 Erreurs commises en utilisant les fonctions p_j au lieu des valeurs f_j des tables pour le dodécane et sa vapeur	204
7.5 Propriétés de l'eau à saturation.	208
7.6 Propriétés du dodécane à saturation	215

Nomenclature

Les principales notations utilisées dans ce document sont rassemblées dans la nomenclature qui suit.

Géométrie

La diffusion numérique inhérente à tout schéma numérique ne peut préserver exactement la discontinuité initiale des variables lors du passage d'un choc par exemple. Il se crée alors une zone de mélange artificielle dans laquelle il faut définir toutes les variables.



Vecteurs

- α scalaire
- \mathbf{a} vecteur
- \mathbb{A} matrice ou tenseur

Opérateurs et tenseurs

- $d\star$ différentielle de \star

$d^2 \star$	matrice hessienne de \star
$D_t \star \stackrel{\text{def}}{=} \partial_t \star + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} \star$	dérivée particulaire ou matérielle de \star
\otimes	produit tensoriel
$\text{div} \mathbf{a}$ ou $\nabla \cdot \mathbf{a}$	divergence de \mathbf{a}
$\mathbf{grad} b$ ou ∇b	gradient de b
$\text{rot} \mathbf{a}$ ou $\nabla \times \mathbf{a}$	rotationnel de \mathbf{a}

Indices et exposants

$\alpha = 1, 2$	indice désignant la phase α
\star_α	quantité \star relative à la phase α
\star_{liq}	quantité \star relative à la phase liquide
\star_{vap}	quantité \star relative à la phase vapeur
\star_ε	dérivée de \star par rapport à ε
\star_τ	dérivée de \star par rapport à τ
$\star_{\tau\tau}$	dérivée seconde de \star par rapport à τ
$\star_{\tau\varepsilon}$	dérivée seconde croisée de \star par rapport à τ et ε
$\star_{\varepsilon\varepsilon}$	dérivée seconde de \star par rapport à ε
\star^{eq}	quantité \star à l'équilibre
\star^*	quantité \star le long de la courbe de saturation
\star^{sat}	quantité \star dans le dôme de saturation (en fonction de T ou P)

Grandeurs caractéristiques des écoulements

z	fraction volumique de la phase $\alpha = 1$
y	fraction massique de la phase $\alpha = 1$
ψ	fraction d'énergie de la phase $\alpha = 1$
$\mathbf{Y} \stackrel{\text{def}}{=} (z, y, \psi)$	vecteur des fractions
$\mathcal{T} \stackrel{\text{def}}{=} [0, 1]^3$	ensemble de définition de \mathbf{Y}
ρ	densité massique
τ	volume massique
ε	énergie interne massique
e	énergie totale massique
\mathbf{u}	vitesse
s	entropie massique
$\mathbf{w} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, \varepsilon)$	état thermodynamique
\mathcal{C}	ensemble de définition de \mathbf{w}
$\widehat{\mathbf{w}} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, s)$	état thermodynamique
$\widehat{\mathcal{C}}$	ensemble de définition de \mathbf{w}
$\mathbf{w} \mapsto s$	loi d'état complète
$\widehat{\mathbf{w}} \mapsto \varepsilon$	loi d'état complète
$(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y_1, y_2) \mapsto \sigma$	entropie du mélange hors équilibre

$(\mathbf{w}, \mathbf{Y}) \mapsto \tilde{\sigma}$	entropie du mélange hors équilibre
$\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$	entropie de changement de phase
$\mathcal{Q}(\mathbf{w})$	ensemble de définition de s^{eq}
$\hat{\mathbf{w}} \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$	énergie de changement de phase
$\hat{\mathcal{Q}}(\hat{\mathbf{w}})$	ensemble de définition de ε^{eq}
\mathbf{w}_{α}^*	état \mathbf{w} sur la courbe de saturation
V	volume volumique
E	énergie volumique
S	entropie volumique
$\mathbf{W}^{\text{def}}(V, E)$	état thermodynamique volumique
$(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, y_1, y_2) \mapsto \hat{\tilde{\sigma}}$	entropie du mélange hors équilibre
$(\mathbf{W}, \mathbf{W}_1, y) \mapsto \hat{\sigma}$	entropie du mélange hors équilibre
P	pression thermodynamique
T	température thermodynamique
g	enthalpie libre ou potentiel chimique ou potentiel de Gibbs
h	enthalpie
f	énergie libre ou potentiel de Helmholtz
\mathcal{L}	suivant le contexte, lagrangien ou chaleur latente massique
γ	exposant adiabatique
Γ	coefficient de Grüneisen
g	chaleur molaire adimensionnée
$T \mapsto \star^{\text{sat}}$	quantité \star à saturation
$P \mapsto \star^{\text{sat}}$	quantité \star à saturation
c	vitesse du son
\mathbf{q}	flux thermique conductif
ϑ	coefficient de diffusion thermique
$\mathbf{g}^{\text{def}}(0, -\tilde{g})$	force de gravité
\mathfrak{T}	force de tension de surface
ζ	coefficient de tension de surface
$\mu_j, j = z, y, \psi$	coefficients de relaxation

Grandeurs géométriques et temporelles

Ω	ensemble de \mathbf{R}^d , $d = 1, 2, 3$
$\overset{\circ}{\Omega}$	intérieur de Ω
$\partial\Omega$	bord du domaine Ω
\mathbf{x}	point en coordonnées eulériennes
\mathbf{X}	point en coordonnées lagrangiennes
ξ	vecteur déplacement virtuel
t	temps

Grandeurs liées à la discrétisation

Δx	pas d'espace dans la direction des abscisses
Δy	pas d'espace dans la direction des ordonnées
Δt	pas de temps
$i = 1, \dots, I$	numérotation des mailles de la discrétisation le long de la direction des abscisses
$j = 1, \dots, J$	numérotation des mailles de la discrétisation le long de la direction des ordonnées
$i = -1, 0, I + 1, I + 2$	mailles fantômes le long de la direction des abscisses
$j = -1, 0, J + 1, J + 2$	mailles fantômes le long de la direction des ordonnées
$i + 1/2$	interface entre la maille d'indice i et la maille d'indice $i + 1$
$j + 1/2$	interface entre la maille d'indice j et la maille d'indice $j + 1$

CHAPITRE 1

Introduction

1.1 Contexte industriel	2
1.1.1 Schéma de principe d'une centrale nucléaire à eau sous pression	3
1.1.2 Circuit primaire	5
1.2 Crise d'ébullition.	7
1.3 Simulation numérique : un outil de modélisation	10
1.3.1 Simulation numérique directe (SND)	11
1.4 Modélisation.	12
1.4.1 Interfaces diffuses et loi de fermeture	13
1.4.2 Loi d'état de changement de phase	15
1.4.3 Propriétés mathématiques	16
1.5 Méthode numérique	16
1.5.1 Approche par relaxation	17
1.5.2 Schéma	17
1.5.3 Simulations	18
1.6 Plan de la thèse	21

Résumé

LES TRANSFERTS THERMIQUES en régime d'ébullition sont très efficaces, ce qui explique le fait que le changement de phase liquide-vapeur soit le moyen le plus utilisé dans l'industrie pour transférer la chaleur et donc refroidir des parois chaudes. Les applications sont très différentes, s'étendant du refroidissement des cœurs dans les centrales nucléaires aux échangeurs de chaleur ou encore aux caloducs diphasiques pour le refroidissement des processeurs des ordinateurs portables. Une bonne prévision de l'ébullition est aussi nécessaire dans les ergols liquides contenus dans les réservoirs des engins spatiaux.

Dans l'industrie nucléaire, les phénomènes de changement de phase jouent un rôle important aussi bien en fonctionnement nominal qu'en si-

tuation incidentelle ou accidentelle et occupent par conséquent une place considérable dans les études de sûreté. Par exemple, on rencontre des situations où le cœur du réacteur peut être le siège d'un écoulement bouillant en cas de brèche dans le circuit primaire. D'autres composantes du réacteur, comme les générateurs de vapeur qui sont des échangeurs de chaleur entre les circuits primaire et secondaire, sont également le siège d'écoulements bouillants et ce même en fonctionnement nominal.

Cependant, malgré le caractère banal de l'ébullition que l'on peut facilement observer au quotidien, les mécanismes physiques locaux restent encore relativement mal compris, surtout à l'échelle microscopique, échelle la plus importante pour les applications. C'est le cas notamment à fort flux de chaleur imposé en paroi où la création d'un film de vapeur peut conduire à sa destruction. Ce risque, potentiellement dévastateur pour les installations industrielles, est aujourd'hui maîtrisé en s'appuyant sur des corrélations expérimentales. Cependant, le recours à l'expérience trouve parfois ses limites car ce phénomène est très violent. Il est donc nécessaire de développer d'autres voies pour l'appréhender. C'est dans ce cadre que l'on va utiliser la simulation numérique directe : en décrivant le mouvement de chaque bulle de l'écoulement, elle permet d'étudier les mécanismes de l'ébullition à l'échelle la plus fine.

Dans cette thèse, qui s'inscrit dans une collaboration entre le Centre de Mathématiques Appliquées (CMAP) de l'École Polytechnique, la Facoltà di Matematica de l'Università di Trento et le Laboratoire d'Études Thermiques des Réacteurs (LETR) du Commissariat à l'Énergie Atomique (CEA), nous nous intéresserons plus particulièrement à la simulation numérique directe du changement de phase liquide-vapeur au sein du cœur d'un réacteur à eau pressurisée.

Dans ce chapitre initial on introduit quelques notions de base sur les réacteurs à eau pressurisée qui fixent le cadre physique dans lequel on veut étudier le phénomène de l'ébullition et notamment la crise d'ébullition. On décrit ensuite brièvement le modèle développé et la stratégie numérique adoptée pour sa simulation numérique. On conclut enfin par un esquisse de la structure globale de la thèse.

1.1. Contexte industriel

La sûreté et l'amélioration des performances des centrales nucléaires nécessitent d'avoir une connaissance précise des écoulements dans les circuits des réacteurs. La thermohydraulique, qui s'intéresse à la modélisation globale d'un réacteur dans lequel

circule le fluide caloporteur,¹ permet de comprendre le comportement du système en cas d'accident ou de prévoir son évolution à la suite d'un incident d'exploitation. La majorité des études de thermohydraulique menées au Laboratoire d'Études Thermiques des Réacteurs (LETR) du CEA porte sur le comportement de ce fluide en cas d'écart au fonctionnement normal.

Concrètement, la maîtrise de l'extraction de la chaleur de cœurs de réacteurs nécessite l'acquisition de connaissances sur les écoulements de fluides diphasiques (c'est-à-dire des mélanges d'eau et de vapeur) que l'on étudie de l'échelle microscopique à celle du système complet. Cette étude étant très complexe, ce domaine repose en grande partie sur la modélisation et la simulation numérique.

Pour mieux comprendre le phénomène de la crise d'ébullition dans le cœur d'un réacteur nucléaire, il est opportun de rappeler quelques concepts de base du fonctionnement d'une centrale nucléaire. Une centrale nucléaire est destinée à produire de l'électricité à partir d'un combustible nucléaire. Il existe plusieurs familles de centrales, que l'on appelle filières, caractérisées par la combinaison de trois éléments fondamentaux : un caloporteur, un modérateur (si nécessaire) et un combustible. De très nombreuses formules ont été expérimentées depuis les débuts de l'ère nucléaire industrielle mais seulement un petit nombre d'entre elles ont été sélectionnées pour les différentes générations de réacteurs opérationnels électrogènes. Il se trouve que la filière des *réacteurs à eau sous pression* (REP en français ou PWR en anglais pour *Pressurized Water Reactor*) est la plus répandue au monde : ces réacteurs produisent environ la moitié de l'électricité mondiale d'origine nucléaire. Actuellement en France tous les réacteurs nucléaires de production sont de ce type.

1.1.1. Schéma de principe d'une centrale nucléaire à eau sous pression

Tout système construit autour d'un réacteur nucléaire est une machine thermique : comme les centrales thermiques classiques brûlant des combustibles fossiles (charbon, fioul), les centrales nucléaires utilisent la chaleur provenant d'une «chaudière», en l'occurrence délivrée par les éléments combustibles où se déroulent les fissions. Cette chaleur est ensuite transformée en énergie électrique.

Un réacteur à eau sous pression est un réacteur nucléaire modéré et refroidi par de l'eau ordinaire qui, dans les conditions normales de fonctionnement, est maintenue sous forme liquide dans le cœur grâce à une pression appropriée. Avant d'expliquer en quoi consiste ce double rôle de modérateur et de caloporteur, commençons par introduire les trois circuits principaux présents dans un réacteur à eau sous pression (voir figure 1.1) :

circuit primaire : dans le cœur du réacteur la fission nucléaire produit une grande quantité de chaleur. L'eau, chauffée à plus de 330 °C, circule (au moyen de pompes)

¹Le circuit primaire d'un réacteur nucléaire contient le fluide caloporteur qui transporte vers le circuit secondaire la chaleur créée dans le cœur.

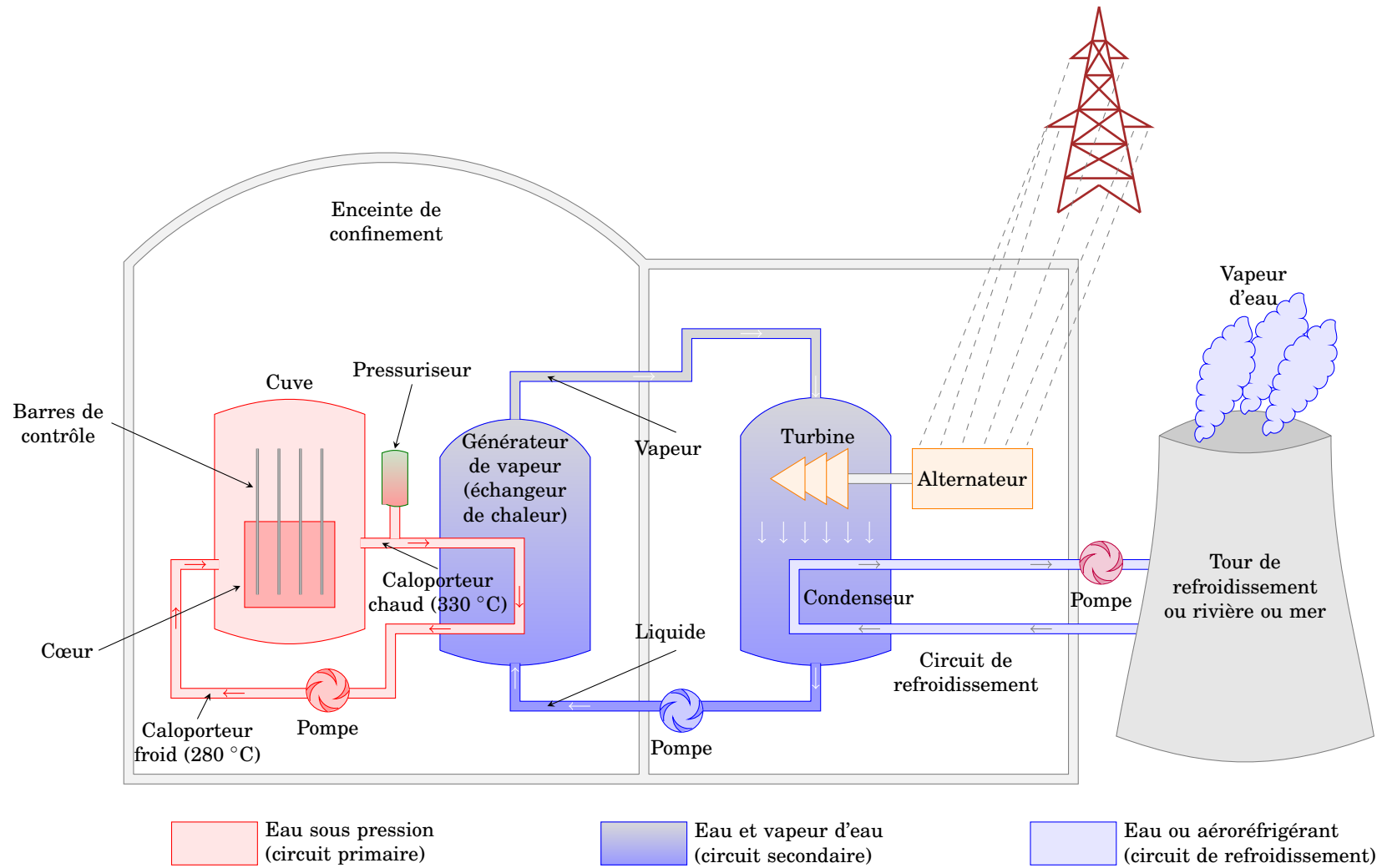


FIG. 1.1.: Schéma de principe d'une centrale nucléaire avec réacteur à eau sous pression (REP).

dans le circuit primaire, fermé et étanche, où elle est mise sous pression pour la maintenir sous forme liquide. Cette eau (dans le rôle de caloporteur) transfère la chaleur à un circuit secondaire via un échangeur de chaleur ;

circuit secondaire : le caloporteur du circuit primaire s'échauffe au contact du combustible et il sort du cœur du réacteur à une température élevée (entre 330 °C et 550 °C). Ce caloporteur est ensuite utilisé pour chauffer l'eau du circuit secondaire dans le générateur de vapeur et la porter à ébullition pour produire de la vapeur. Cette vapeur entraîne ensuite une turbine couplée à un alternateur produisant de l'électricité. Remarquons que le circuit d'eau qui circule dans le cœur (circuit primaire) est distinct de celui qui effectue la conversion proprement dite de l'énergie (circuit secondaire) pour éviter toute dispersion de substance radioactive à l'extérieur de la centrale ;

circuit tertiaire : à la sortie de la turbine, la vapeur du circuit secondaire se condense en eau dans un condenseur refroidi par le circuit tertiaire constitué d'une source froide (l'eau d'un fleuve ou de la mer) et/ou de tours de refroidissement.

1.1.2. Circuit primaire

Dans cette thèse on s'intéresse principalement aux changements de phase qui ont lieu dans le circuit primaire autour des crayons de combustible. Les composants principaux de ce circuit sont brièvement décrits ci-dessous.

La cuve : c'est une enceinte métallique étanche renfermant le cœur du réacteur, les structures de support de ce cœur et les structures de guidage des barres de contrôle. Elle constitue la partie centrale du circuit primaire.

Le cœur : c'est la région où sont entretenues les réactions en chaîne ; il contient le combustible et les barres de contrôle (voir figure 1.2 à la page suivante). Dans les REP du type de ceux exploités en France, le cœur est haut d'environ 4 m et il contient le combustible (oxyde d'uranium enrichi ou mélange d'oxydes d'uranium et de plutonium) sous forme de pastilles empilées dans des tubes métalliques appelés crayons. Ces tubes sont eux-mêmes regroupés en assemblages. Les assemblages — au nombre de 157 à 205 suivant la puissance du réacteur — baignent dans de l'eau sous pression (~ 155 bar) qui sert à la fois de caloporteur et de modérateur ralentissant les neutrons pour rendre plus efficace la réaction de fission.

Les barres de contrôle : dans un réacteur, le contrôle permanent de la réaction en chaîne est assuré grâce à des «barres de contrôle» en matériau absorbant les neutrons. Elles sont généralement regroupées en grappes qui coulissent à la demande des opérateurs pour faire varier la réactivité et donc la puissance du réacteur.² De plus, en cas d'incident, l'enfoncement complet, ou la chute, de ces barres au sein du cœur stoppe presque instantanément la réaction en chaîne.

²Ceux-ci peuvent par ailleurs introduire dans le circuit primaire de l'acide borique qui présente également la propriété d'absorber les neutrons.

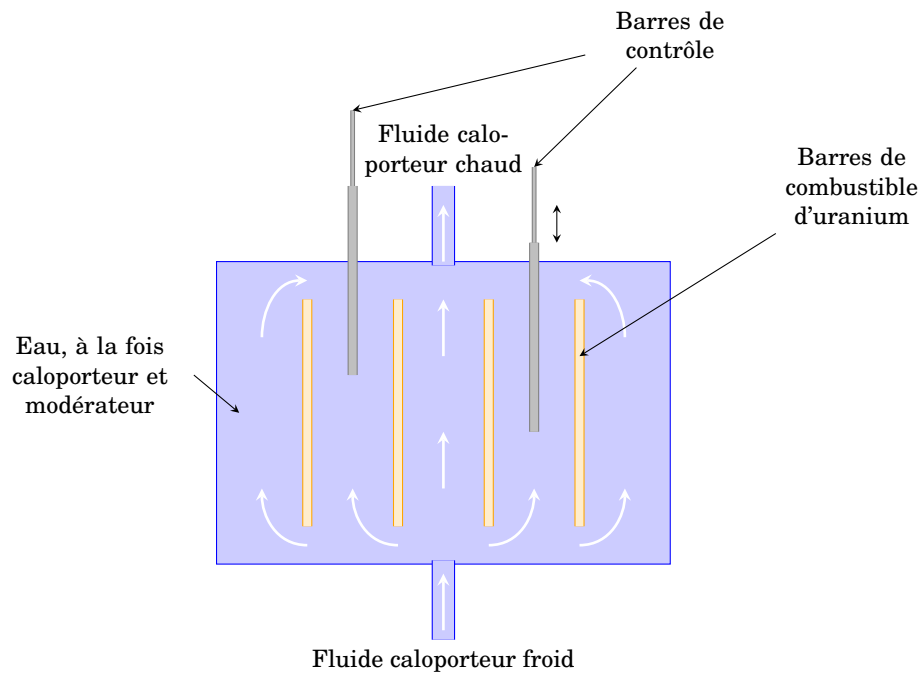


FIG. 1.2.: Schéma du cœur d'un REP : l'eau y joue le double rôle de caloporteur (transfert de chaleur) et de modérateur (ralentisseur de neutrons)

Le fluide caloporteur : comme son nom l'indique, il s'agit d'un fluide réfrigérant transporteur de chaleur : le fluide caloporteur évacue du cœur l'énergie thermique dégagée sous forme de chaleur lors de la fission des noyaux d'uranium et transporte les calories vers les systèmes qui transformeront cette énergie en électricité. Dans les REP le fluide caloporteur est l'eau. En circulant entre les crayons de combustible avant de céder sa chaleur au circuit secondaire au niveau du générateur de vapeur, ce fluide joue deux rôles : prendre la chaleur du combustible pour la transporter hors du cœur du réacteur et maintenir la température de celui-ci à une valeur compatible avec la tenue des matériaux (sa température passe d'environ 280 °C à plus de 330 °C). Le combustible est entouré d'une gaine métallique formant un boîtier étanche afin de l'isoler du fluide caloporteur. Cette précaution permet d'éviter que le combustible, qui est très chaud, soit directement en contact avec le caloporteur, ce qui pourrait provoquer des réactions chimiques entre les deux. Elle empêche aussi que des particules du combustible puissent passer dans le caloporteur et sortir ainsi de la cuve du réacteur.

Le modérateur : en plus du combustible gainé, du caloporteur et des barres de contrôle, les REP comportent un modérateur. Celui-ci a un rôle essentiel : il doit ralentir les neutrons qui sont trop énergétiques pour provoquer efficacement une nouvelle fission. Ces neutrons, du fait de leur grande énergie, se déplacent à grande vitesse (≈ 20000 km/s). Or, lorsque les neutrons ont une trop grande vitesse, ils passent trop vite à proximité des atomes d'uranium et les réactions de fission sont difficiles à obtenir. Pour que les réactions de fission se produisent plus facilement, et

en plus grand nombre, il faut donc ralentir considérablement les neutrons, d'une vitesse de 20000 km/s jusqu'à une vitesse de l'ordre de 2 km/s. Les neutrons sont freinés lorsqu'ils traversent une matière composée d'atomes dont les noyaux ne les absorbent pas. Ce ralentissement se produit rapidement lorsque les obstacles sont des noyaux légers, de masse voisine de celle des neutrons, tels que ceux d'hydrogène. La matière constituée par ces atomes est appelée le modérateur. Un exemple de modérateur est le graphite, utilisé dès la première «pile» atomique, en 1942 en association avec un fluide caloporteur gazeux. Dans les REP le modérateur est le même fluide caloporteur, c'est-à-dire l'eau du circuit primaire.

Le pressuriseur : la pressurisation maintient l'eau du circuit primaire à l'état liquide pour éviter l'ébullition.

Pour plus d'informations sur les réacteurs nucléaires nous renvoyons le lecteur vers Basdevant *et al.* [11] et vers le site web du CEA (<http://www.cea.fr>).

1.2. Crise d'ébullition : de l'ébullition nucléée à l'ébullition en film

L'accident le plus communément envisagé pour le dimensionnement des systèmes de sûreté d'un REP est celui de la rupture brutale d'une canalisation du circuit primaire qui refroidit le cœur du réacteur. La violente dépressurisation qui en découlerait provoquerait l'ébullition de l'eau du circuit et la formation d'un écoulement diphasique (mélange d'eau et vapeur), dont il s'avère indispensable de bien prédire les caractéristiques pour déterminer avec suffisamment de fiabilité le comportement de l'installation. L'ébullition de l'eau peut se rencontrer aussi lors de l'éjection d'une barre de contrôle. Dans les deux cas, un film de vapeur, plus mauvais conducteur de chaleur que l'eau, pourrait se former soudainement autour d'un ou plusieurs crayons. Ceux-ci seraient alors «isolés» de l'eau de refroidissement et la température du combustible pourrait atteindre très rapidement des valeurs très importantes, jusqu'à la fusion de la gaine métallique qui sépare l'uranium de l'eau (voir par exemple la figure 1.3).

Cette formation soudaine d'un film de vapeur autour des crayons de combustible est la manifestation d'un phénomène microscopique appelé «crise d'ébullition». Plus généralement, la *crise d'ébullition* sur une paroi chauffante est une transition entre deux régimes d'ébullition (voir figure 1.4) : l'ébullition nucléée, dans laquelle des bulles se forment sur la surface chauffante, et l'ébullition en film, dans laquelle la surface chauffante est couverte par un film continu de vapeur la séparant du liquide. Bien qu'il s'agisse d'un phénomène physique local, il a des conséquences macroscopiques importantes car ce passage comporte une très grande et très brutale augmentation de la température de la paroi chauffée. En effet, le coefficient d'échange thermique paroi/vapeur est beaucoup plus faible que celui paroi/fluide, sans parler du fait que la vaporisation «consomme» de l'énergie sous forme de chaleur latente. Cette augmentation peut être telle qu'elle conduit à la destruction de la paroi, ce qui constitue un problème potentiel de sûreté des installations industrielles. En particulier, dans les REP elle peut avoir



(a) Crayon



(b) Assemblage

FIG. 1.3.: Endommagement par «isolation» de la paroi chaude du liquide de refroidissement (expérience OMEGA, CEA)

des conséquences très graves car, la vapeur étant un mauvais conducteur de la chaleur, le flux de chaleur évacué par le fluide caloporteur autour des crayons de combustible chute brutalement.

Si la maîtrise de ce phénomène est essentielle dès la conception des réacteurs puisqu'il dimensionne toute la partie «transport thermique», les mécanismes qui en sont responsables sont encore mal compris et controversés malgré de récents progrès. Même l'échelle significative à laquelle il faut étudier le phénomène est toujours sujette à question. Cela tient principalement au fait que les mécanismes de base à l'origine de la crise d'ébullition ont lieu à des échelles de temps et d'espace extrêmement petites, ce qui rend encore difficile le recours à l'expérimentation (les parois fondent subitement lorsqu'on atteint la crise d'ébullition) et limite fortement l'accès à des données expérimentales pertinentes.

Heureusement, l'amélioration constante des méthodes de simulation numérique et l'augmentation régulière des capacités des ordinateurs permettent aujourd'hui d'envisager l'utilisation de la simulation numérique pour aider à la compréhension des mécanismes physiques conduisant à cette brusque transition. En effet, la simulation numérique est devenue un outil essentiel de la recherche scientifique, technologique et industrielle car elle permet de remplacer les expériences quand elles sont par exemple dangereuses, de longue durée, inaccessibles ou interdites ; elle permet aussi de réaliser

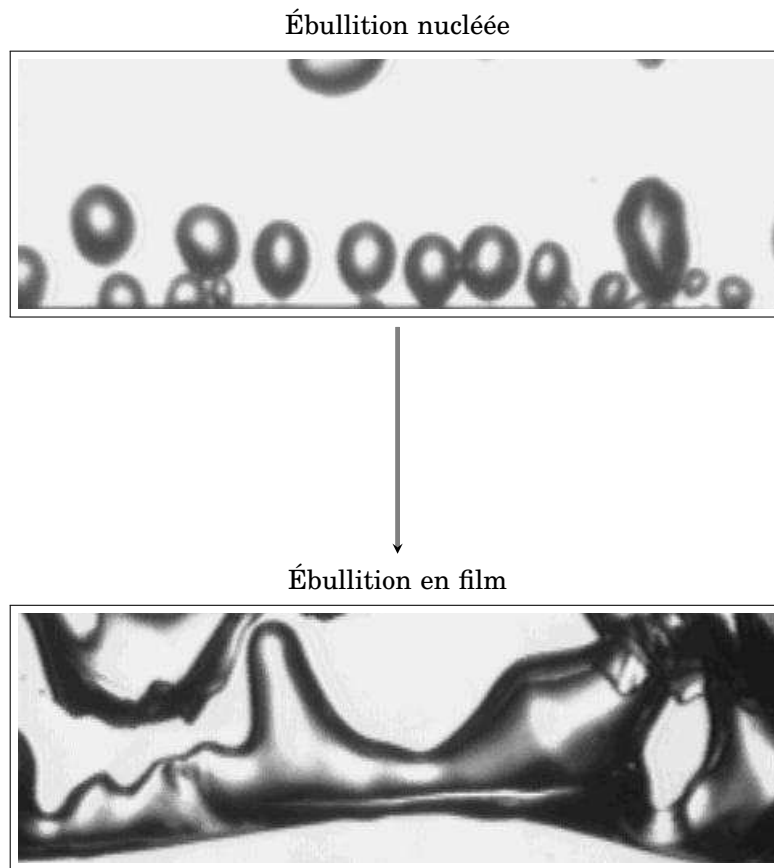


FIG. 1.4.: Crise d'ébullition : passage de l'ébullition nucléée à l'ébullition en film à contact d'une paroi chauffée. Au cours de ce processus, on observe une transition presque instantanée entre un régime d'ébullition dite nucléée et un régime d'ébullition en film pour lequel la paroi est recouverte d'un film de vapeur d'eau mauvais conducteur de la chaleur. À l'instant où le régime de bulles cesse, la paroi se retrouve subitement isolée par ce film de vapeur et ne parvient pas à évacuer le flux de chaleur, ce qui conduit à l'endommagement voir la destruction définitive de la paroi chauffante. Pour cette raison, les expériences sont difficiles et peu reproductibles. Cette crise d'ébullition est pourtant déterminante pour le fonctionnement et le dimensionnement des réacteurs nucléaires. (Les images sont issues de http://www.spaceflight.esa.int/users/fluids/TT_boiling.htm.)

des augmentations de productivité en procurant un gain de temps et en optimisant les performances.

En particulier, la modélisation physique et la simulation numérique du fonctionnement des réacteurs nucléaires permettent aujourd'hui de concevoir des installations toujours plus sûres en étudiant les configurations accidentelles, même hypothétiques, autrement inaccessibles par l'expérimentation directe.

1.3. Simulation numérique : un outil de modélisation

Dans le cadre de la sûreté des installations nucléaires, notamment celle des réacteurs à eau sous pression, la simulation numérique peut prendre en compte dès la conception tous les types de scénario possibles : conditions nominales mais aussi accidentelles (même les plus improbables). Le calcul de ces situations complexes nécessite des modèles et des algorithmes décrivant le mieux possible la phénoménologie des écoulements diphasiques. Dans le cas des écoulements dans le cœur d'un REP il faut tout d'abord disposer d'un modèle qui devra distinguer les deux formes sous laquelle l'eau du circuit de refroidissement peut être présente, c'est-à-dire le liquide et la vapeur. Le rôle respectif des deux phases dans le refroidissement du cœur n'est en effet pas du tout le même, car *le liquide évacue plus facilement l'énergie produite que la vapeur*. De plus, lorsqu'elles sont toutes deux présentes dans les canalisations, elles interagissent évidemment l'une avec l'autre (ainsi qu'avec les structures métalliques). Le modèle doit donc prendre en compte des corrélations, tels les échanges de masse et d'énergie à l'interface liquide-vapeur (ébullition, condensation), les échanges de quantité de mouvement entre liquide et vapeur (frottement interfacial par exemple) et les échanges d'énergie entre chaque phase et les parois (échanges convectifs, ébullition ou condensation locale etc.). De la pertinence de ces corrélations dépendra le réalisme des simulations.

Concrètement le but poursuivi par la simulation numérique est de disposer de modèles et de méthodes qui soient à la fois précis et performants dans le sens où ils permettent de simuler des écoulements complexes avec la présence de plusieurs inclusions (cette contrainte est liée à la vocation industrielle des applications visées). Donc ces simulations concernent des *modèles physiques de mécanique des fluides avec des écoulements diphasiques* de «grandes dimensions» et très complexes.

Les modèles basés sur des équations moyennées des écoulements diphasiques sont les seuls actuellement capables de résoudre des problèmes industriels. Pour être pertinents, ces modèles doivent rendre compte des principaux phénomènes physiques du problème étudié. Aujourd'hui seuls des modèles macroscopiques basés sur des corrélations expérimentales sont capables d'assurer le fait que la crise d'ébullition n'apparaît pas pour les conditions de fonctionnement d'une installation industrielle. Ils sont cependant limités à des configurations industrielles particulières avec des marges de sûreté importantes.

Pourtant, la relative méconnaissance actuelle des mécanismes de base à l'origine

de la crise d'ébullition empêche le développement de fermetures pertinentes pour sa modélisation à l'échelle moyennée, raison pour laquelle aucun modèle ne donne actuellement pleine satisfaction. Bien que le travail de modélisation soit déjà considérable, l'étude des phénomènes locaux semble être primordiale pour une meilleure connaissance du comportement du fluide à plus grande échelle.

Même si de nos jours les seuls modèles diphasiques pouvant être utilisés pour l'étude de dispositifs industriels sont les modèles moyennés (en espace, en temps ou statistiquement), ceux-ci doivent néanmoins être fermés. Déterminer ces fermetures est un enjeu majeur, notamment dans des situations physiques complexes telles que l'ébullition pariétale à fort flux.

L'évolution des techniques de calcul scientifique et l'augmentation de la puissance de calcul permettent aujourd'hui d'envisager l'utilisation d'outils numériques pour l'étude de ces mécanismes fondamentaux et de modéliser ces échelles : en réalisant des séries de *simulations de modèles «fins»* on espère mieux comprendre les phénomènes et donc mieux les modéliser aux échelles «moyennes». C'est à ce niveau qu'intervient ce qu'on appelle la «simulation numérique directe» des écoulements diphasiques. Elle consiste en la résolution des équations du mouvement locales et instantanées où toutes les interfaces sont décrites individuellement et peut être vue comme un outil complémentaire aux études expérimentales puisqu'elle permet d'avoir accès à toutes les informations locales nécessaires à la validation ou au développement de fermetures des modèles moyennés.

1.3.1. Simulation numérique directe (SND)

La *simulation numérique directe* (SND) consiste à simuler numériquement toutes les échelles spatio-temporelles d'un écoulement. En particulier, toutes les inclusions (bulles ou gouttes) de l'écoulement sont décrites individuellement. En comparaison à la simulation numérique des écoulements monophasiques, la difficulté principale réside dans la localisation des interfaces mobiles qui séparent le liquide de la vapeur.

Il est important de souligner que, du fait des limitations liées aux moyens de calcul, il n'est pas encore envisageable d'appliquer la SND à des problèmes de grande échelle de type industriel (par exemple la simulation du cœur en entier). L'échelle la plus fine à laquelle les écoulements diphasiques peuvent être simulés numériquement est actuellement l'échelle de quelques dizaines voire quelques centaines de bulles, où chaque bulle est décrite individuellement. Les informations détaillées obtenues à cette échelle permettront de parfaire la connaissance des écoulements et ainsi d'améliorer les modèles macroscopiques existants, par exemple permettant de déterminer de meilleures relations de fermeture à utiliser dans les modèles moyennés. En effet, le développement des méthodes de simulation numérique directe s'inscrit dans une démarche multi-échelle de modélisation des écoulements diphasiques.

En vue de réaliser des simulations numériques directes de la dynamique de l'ébullition nucléée, cette thèse porte sur le développement, l'analyse et les premières résolu-

tions numériques d'un modèle «fin» décrivant l'évolution d'un fluide diphasique pouvant changer de phase et où chaque bulle de l'écoulement est prise en compte individuellement.

1.4. Modélisation

La simulation numérique des écoulements liquide-vapeur dans des conditions réalistes est un véritable défi à l'égard des multiples difficultés relatives à la modélisation physique autant qu'aux méthodes numériques. En effet, il s'agit de représenter un écoulement comportant des interfaces liquide-vapeur de dynamique rapide avec de plus des changements de phase.

À l'échelle la plus locale, un écoulement diphasique est constitué de fluides monophasiques (la vapeur et le liquide) séparés par des interfaces mobiles. Une des complexités de ces écoulements (avec ou sans changement de phase) provient justement de la présence de ces interfaces qui sont le siège d'échanges entre les phases et dont la position est une inconnue supplémentaire du problème (par rapport au cas monophasique).

Parmi les méthodes qui permettent l'étude de la dynamique de ces interfaces, nous privilégions une approche de «capture» d'interface sur un maillage eulérien plutôt que le «suivi» lagrangien d'une interface. Dans cette modélisation les mouvements des phases sont régis par un seul système d'équations aux dérivées partielles. Du point de vue de la résolution numérique cela signifie que les interfaces ne sont plus des surfaces que l'on doit suivre et auxquelles il faut vérifier des bilans interfaciaux, mais qu'elles sont des solutions particulières du système résolu. Ces méthodes présentent l'avantage de pouvoir facilement prendre en compte l'évolution de plusieurs inclusions au sein d'un même domaine et, en conséquence, de tenir compte des changements de topologie du système diphasique. En contrepartie, numériquement cette approche s'accompagne inévitablement d'une certaine diffusion artificielle de l'interface, qui a pour conséquence la création d'une zone numérique de «mélange» des deux milieux. En d'autres termes, dans cette approche les interfaces sont modélisées comme des surfaces de discontinuité mais où, pour des raisons purement numériques, il est nécessaire de transformer certaines discontinuités en fonctions continues. Bien que parfaitement compréhensible, cette manière de procéder n'est pas clairement justifiée d'un point de vue physique. Si l'on souhaite garder les avantages de l'utilisation d'un maillage fixe, on doit, à un moment donné de la résolution numérique, distribuer sur le maillage fixe des grandeurs normalement discontinues ou concentrées sur les surfaces de discontinuité. L'idée est alors de *considérer dès la formulation mathématique du problème, c'est-à-dire dès l'écriture des équations aux dérivées partielles, que les interfaces ne sont pas des surfaces de discontinuité mais des zones volumiques de transition.*

Si le cadre général des modèles à interface diffuse est bien adapté à notre type de problème car ils permettent notamment de rendre compte sans grand effort numérique ni

algorithmique des changements topologiques, la connaissance du comportement thermodynamique dans cette zone de diffusion s'avère cependant essentielle pour la bonne marche de la résolution. Néanmoins, elle s'avère délicate, ces états étant purement fictifs. De plus, si l'état thermodynamique est mal déterminé, les méthodes numériques échouent très rapidement en raison de pressions négatives par exemple ou de vitesses du son complexes.

Donc, pour pouvoir capturer ces interfaces «épaissies» on a besoin d'un modèle qui «tolère» les épaississements, c'est-à-dire qui permet le calcul dans les zones diffuses aussi bien que dans les zones monophasiques et qui dégénère vers le modèle discontinu lorsque l'épaisseur de l'interface tend vers zéro. La meilleure manière de la déterminer est de se baser sur des principes physiques, ce qui garantit la cohérence de la formulation.

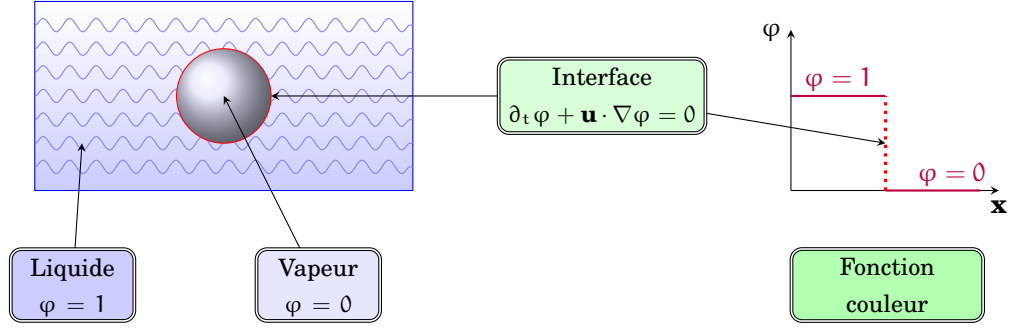
1.4.1. Interfaces diffuses et loi de fermeture

Dans le cadre de la mécanique des milieux continus, tout état de la matière est caractérisé par plusieurs variables macroscopiques, telles la densité molaire $(\mathbf{x}, t) \mapsto \rho(\mathbf{x}, t)$, la vitesse $(\mathbf{x}, t) \mapsto \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ et l'énergie interne molaire $(\mathbf{x}, t) \mapsto \varepsilon(\mathbf{x}, t)$. Son évolution est décrite par les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale. On obtient ainsi le système des équations d'Euler décrivant l'évolution d'un fluide compressible non visqueux en l'absence d'échanges de chaleur avec l'extérieur :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = 0, \\ \partial_t \left(\rho \left(\frac{|\mathbf{u}|^2}{2} + \varepsilon \right) \right) + \operatorname{div} \left(\rho \left(\frac{|\mathbf{u}|^2}{2} + \varepsilon \right) \mathbf{u} + P \mathbf{u} \right) = 0. \end{cases}$$

Une relation supplémentaire modélisant les propriétés du fluide doit alors être connue pour fermer ce système : il s'agit d'une équation d'état qui permet de trouver la pression en fonction des autres variables d'état $(\rho, \varepsilon) \mapsto P$.

La modélisation que nous allons étudier est de l'ordre de quelques bulles. À cette échelle, la séparation entre le liquide et sa vapeur est un front de discontinuité à travers lequel les propriétés du fluide changent. Une approche naturelle pour décrire simultanément la phase liquide et la phase vapeur d'un même fluide est alors l'introduction d'une «fonction couleur» $(\mathbf{x}, t) \mapsto \varphi$ tel que si à l'instant t le fluide est dans sa phase liquide au point \mathbf{x} alors $\varphi(\mathbf{x}, t) = 1$ et si le fluide est dans sa phase vapeur alors $\varphi(\mathbf{x}, t) = 0$.



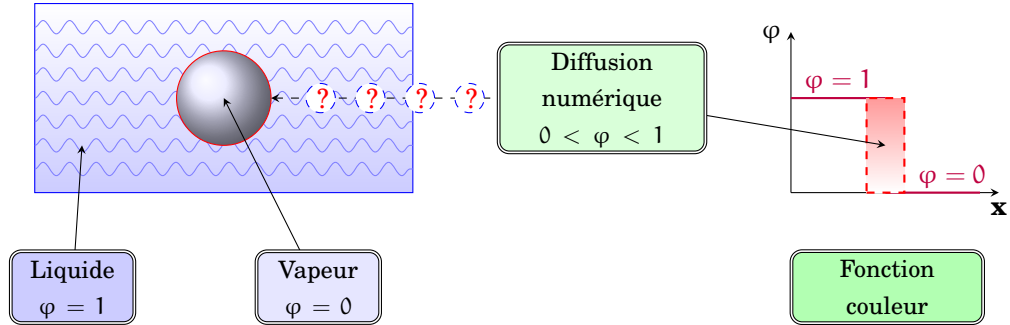
En faisant ainsi on peut définir la pression P de façon naturelle comme

$$(\rho(\mathbf{x}, t), \varepsilon(\mathbf{x}, t)) \mapsto P \stackrel{\text{def}}{=} \varphi(\mathbf{x}, t) P^{\text{liq}}(\rho(\mathbf{x}, t), \varepsilon(\mathbf{x}, t)) + (1 - \varphi(\mathbf{x}, t)) P^{\text{vap}}(\rho(\mathbf{x}, t), \varepsilon(\mathbf{x}, t)).$$

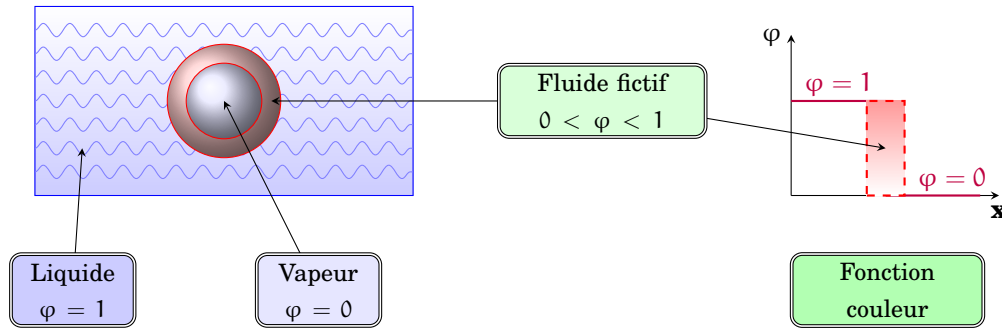
Si pour le moment on ne considère que l'écoulement en négligeant le changement de phase, la position de l'interface est déterminée simplement par la résolution de l'équation de transport

$$\partial_t \varphi + \mathbf{u} \cdot \nabla \varphi = 0.$$

L'équation de transport et les équations d'Euler fermées par la loi de pression ci-dessus sont telles que, si à l'instant initial la fonction couleur φ ne prend que les valeurs 0 ou 1, alors c'est le cas à tout instant $t > 0$. Cependant, la résolution numérique de ces équations fait apparaître une zone de mélange artificiel (correspondant à $0 < \varphi < 1$) dans laquelle il n'est pas possible d'interpréter l'état thermodynamique obtenu (car il n'est pas pris en compte dans le modèle) ni donc de continuer le calcul.



Afin de remédier à ce problème on modifie alors notre modélisation. En introduisant directement dans le modèle un fluide fictif dans ces zones équivalent à un mélange des deux phases, on sera ainsi amené à interpréter les variables physiques au sein des interfaces étalées dès la phase de la modélisation et non lors de la résolution numérique.



Grâce à l'introduction de ce fluide fictif (qu'on appellera «mélange à l'équilibre»), on pourra définir un modèle d'écoulement de deux phases décrit par des variables qui varient fortement mais continûment aux interfaces. La variable φ pourra être interprétée comme une fraction (par exemple massique ou volumique) de la phase 1 dans ce mélange.

Parmi les principaux atouts de cette méthode il y a le fait que les deux phases ne sont pas décrites par des modèles différents incluant une représentation explicite de l'interface, mais par *un modèle unique permettant de résoudre en tout point les mêmes équations avec la même méthode numérique*. Ce dernier est donc un modèle monofluide dans lequel l'écoulement est régi par un jeu d'équations unique pour les deux phases et le fluide fictif. Ainsi la gestion des interfaces et leurs déplacements sont intrinsèques au modèle puisqu'un seul système d'équations aux dérivées partielles suffit pour décrire l'ensemble du système liquide-vapeur, y compris les interfaces. La formulation choisie permet non seulement de rendre compte des fortes variations de masse volumique à travers les interfaces entre phases distinctes, mais également de considérer la fonction couleur φ comme une fonction continue de l'espace. Plus généralement, toutes les grandeurs physiques relatives au fluide peuvent être considérées comme continues en dehors des chocs possibles. On verra de plus que la prise en compte du changement de phase ainsi que les changements de topologie peuvent être faits directement via une définition adéquate de la pression.

1.4.2. Loi d'état de changement de phase

Puisque l'épaisseur des interfaces est artificielle,³ il faut «construire» un fluide fictif dans la zone de coexistence de façon à avoir une et une seule loi d'état continue et valable pour tout (\mathbf{x}, t) . De plus, cette construction devra prendre en compte le changement de phase. Pour cela on pourrait s'inspirer de modèles préexistants ; citons notamment la méthode du second gradient (voir par exemple les thèses de doctorat de Jamet [55] ou de Fouillet [37] ou l'article de Jamet *et al.* [56]) qui s'inspire de la physique aux échelles inférieures pour définir le comportement du fluide dans l'interface,

³ Soulignons que, à des échelles plus fines que celle choisie, les interfaces peuvent effectivement être considérées comme des zones volumiques de transition entre deux phases, mais cette épaisseur est trop faible pour que, à l'échelle à laquelle nous nous sommes placés, les interfaces diffuses de notre modèle puissent être considérées comme physiques.

ou les modèles de type *phase field* (en particulier le modèle développé dans la thèse de doctorat de Ruyer [87]) qui visent à contrôler l'épaisseur de cette interface.

L'approche que nous avons retenue est la suivante : en définissant la fonction couleur φ comme une sorte de «taux de présence», nous nous baserons sur la thermodynamique classique afin de décrire le changement de phase. Le système d'équations aux dérivées partielles que l'on utilise correspond ainsi aux équations d'Euler fermées par une loi d'état de mélange obtenue par maximisation de l'entropie (physique). L'évolution (et donc l'épaisseur) de l'interface est alors contrôlée par les équations classiques de la mécanique des fluides compressibles non visqueux. On tient alors compte du second principe de la thermodynamique via une définition appropriée de la pression qui sera valable dans les phases pures ainsi que dans la zone de coexistence.

Grâce à cette démarche les interfaces et les changements de phase sont définis implicitement. Les interfaces se situent dans les régions de fortes variations de la densité ; leurs déplacements par convection et par changement de phase ainsi que des ruptures ou reconnections d'interfaces sont implicitement pris en compte dans la solution des équations de mouvement. De plus, le changement de phase respecte la thermodynamique classique, c'est-à-dire qu'il tient compte des courbes de saturation.

1.4.3. Propriétés mathématiques

Il est bien connu que la loi de changement de phase ainsi définie est en partie dégénérée au sens où elle est caractérisée par une entropie concave mais pas strictement concave. Ceci peut poser un problème car la stricte concavité de l'entropie est la condition suffisante usuelle qui assure que le système d'Euler est hyperbolique (cette dernière propriété étant nécessaire pour la résolution théorique et numérique des équations). Bien que les vitesses caractéristiques (c'est-à-dire les valeurs propres de la matrice jacobienne) soient réelles, il n'était pas évident que la vitesse du son était non nulle, propriété nécessaire à l'existence d'une base de vecteurs propres réels et donc à l'hyperbolicité du système. Dans Allaire *et al.* [2] nous avons démontré que, sous des hypothèses génériques, le système d'Euler diphasique avec changement de phase est effectivement strictement hyperbolique mais que la vitesse du son est discontinue.

Après avoir démontré la stricte hyperbolicité du système des équations d'Euler muni de cette loi d'état, nous avons rappelé quelques points à propos de l'existence et de l'unicité des solutions du problème de Riemann. Il est bien connu (cf. par exemple Jaouen [58], Menikoff et Plohr [80], Voß [96]) qu'il existe plusieurs solutions entropiques à cause de la discontinuité de la vitesse du son. Il est néanmoins possible de résoudre le problème de Riemann de manière unique grâce au critère entropique de Liu (voir par exemple Jaouen [58], Voß [96]).

1.5. Méthode numérique

À ce stade de l'étude, on a à notre disposition un modèle continu d'interfaces liquide-vapeur, qui semble *a priori* très prometteur pour ce qui est de l'étude de systèmes di-

phasiques avec changement de phase. En effet, il permet d'étudier le mouvement des phases liquide et vapeur ainsi que celui de l'ensemble des zones interfaciales du système considéré avec un seul système d'équations aux dérivées partielles. Le problème de la détermination du mouvement des interfaces du système n'existe plus en tant que tel : les interfaces ne sont qu'une partie de la solution. Elles ne doivent par conséquent plus être traitées comme des objets particuliers et leur mouvement est déterminé de manière passive (en suivant simplement l'évolution des zones à fort gradient de la densité par exemple). Le problème particulièrement épineux qu'est celui du changement de topologie est en particulier levé : les zones interfaciales du domaine peuvent se rompre et se reconnecter sans qu'un traitement particulier ne soit nécessaire.

Cependant, malgré la bonne définition du système des équations d'Euler fermé par la loi de changement de phase, sa résolution reste toutefois très compliquée en pratique à cause de la discontinuité de certaines quantités thermodynamiques au travers du changement de phase (comme la vitesse du son évoquée ci-dessus mais aussi d'autres quantités, notamment la dérivée fondamentale). C'est pourquoi d'un point de vue numérique nous proposons une approche de type «relaxation» (suivant les travaux de Barberon [9], Bouchut [16], Caro *et al.* [24], Chen *et al.* [26], Coquel et Perthame [27], Helluy [46], Helluy et Seguin [48], Saurel et Abgrall [88]).

1.5.1. Approche par relaxation

On montre d'abord que le système des équations d'Euler avec changement de phase peut être obtenu comme limite de relaxation d'une famille de systèmes augmentés contenant des termes sources de relaxation : lorsque les temps caractéristiques de la transition de phase tendent vers zéro, les systèmes augmentés tendent vers l'équilibre thermodynamique modélisant ainsi le phénomène du changement de phase.

Ces systèmes augmentés peuvent être obtenus grâce à l'écriture d'un principe variationnel qui conduit à des systèmes d'équations aux dérivées partielles de type «Euler étendu» avec termes sources. Ces termes sources sont précisément les conditions d'optimalité pour la maximisation d'une entropie de mélange qui est équivalente à une opération classique en optimisation appelée inf-convolution (voir notamment Helluy [46], Helluy et Seguin [48]). Dans cette thèse le système augmenté retenu pour l'écriture d'un schéma numérique est basé sur le système à cinq équations avec fermeture isotherme décrit par Allaire *et al.* [1], Kokh [60].

Dans un travail précédent (voir notamment Caro [21], Caro *et al.* [24]) ce modèle a été partiellement testé et validé sur un écoulement liquide-vapeur 2D avec changement de phase dans un cadre isotherme (*i.e.* sans équation d'énergie).

1.5.2. Schéma

La mise en œuvre numérique de l'approche par relaxation est réalisée par décomposition d'opérateurs sur le système augmenté. Chaque pas de temps est divisé en deux étapes : hydrodynamique sans termes sources, puis relaxation des quantités thermodynamiques en maximisant l'entropie du mélange. Concrètement,

- ❶ dans une première étape, on résout le modèle homogène à cinq équations avec fermeture isotherme, c'est-à-dire sans les termes sources de changement de phase, par une méthode de volumes finis où les flux numériques sont calculés à l'aide d'un solveur de Riemann approché de type Roe (voir Allaire *et al.* [1], Kokh [60]) ;
- ❷ dans la deuxième étape, on prend en compte les termes sources de changement de phase en projetant la solution sur la variété d'équilibre thermodynamique. Autrement dit, connaissant les variables thermodynamiques phasiques, on maximise l'entropie de mélange et on obtient ainsi de nouvelles valeurs des concentrations phasiques.

Afin de simuler la nucléation d'une bulle de vapeur au contact d'une paroi chauffante on a également introduit dans le modèle la diffusion thermique, la gravité et la tension de surface qui sont prises en compte lors de la première étape. Notamment, l'opérateur de diffusion de la chaleur est simulé avec une méthode 2D-implicite en temps pour ne pas être trop pénalisé par la condition CFL. Le traitement de la tension de surface quant à elle a été effectué grâce à une formulation CSF (cf. Brackbill *et al.* [17]) qui remplace la force de surface par un flux dépendant de la fraction volumique.

La méthode de résolution est complètement eulérienne, assure le respect des conditions d'interface, gère les grands rapports de densité entre les fluides tout en autorisant les fortes déformations de l'interface et les changements de topologie (création et détachement d'une bulle, coalescence etc.).

Étude détaillée de l'étape de projection (❷)

Dans le cas de lois d'état simples (comme pour les gaz parfaits) on peut réduire le calcul du maximum de l'entropie de mélange à la résolution (en général numérique) d'une équation non-linéaire (que nous appelons «équation de changement de phase»). Pour des lois d'état de type *stiffened gas* les choses se compliquent. C'est pourquoi nous avons proposé une stratégie de résolution basée sur une approximation au sens des moindres carrés de la courbe de coexistence qui mène à une écriture approchée de l'équation de changement de phase (cf. Faccanoni *et al.* [35]). Nous avons ensuite étendu cette démarche pour des lois d'état quelconques comme celles issues de tables expérimentales.

On a donc une stratégie très générale qui peut se traiter numériquement, une fois pour toutes, avant de faire des simulations numériques d'écoulements.

1.5.3. Simulations

Les résultats numériques sont obtenus grâce à un code de calcul programmé en C et réalisé sur une maquette 2D en maillage cartésien avec une discrétisation de type volumes finis. La partie convective, explicite en temps, fonctionne à l'ordre 1 ou 2 en temps et/ou en espace.

Plusieurs cas tests, représentant des expériences physiques lieu de plusieurs phénomènes, ont permis de valider numériquement le modèle. On peut citer entre autres des tests de coalescence et/ou de création de bulle à la paroi par cavitation et/ou ébullition.

Les exemples de simulations effectuées mettent en évidence certains avantages du modèle et de la méthode de relaxation, à savoir que, pour un coût de calcul modéré, cette approche permet de capturer, sur un maillage eulérien, des fronts à la topologie complexe et changeante. De plus, elle gère aisément les transitions de phase dans un cadre purement compressible et sans localisation précise de l'interface. Il reste bien évidemment à effectuer des cas tests plus réalistes de changement de phase et à analyser les résultats de ce modèle, éventuellement par comparaison avec des expériences.

1.6. Plan de la thèse

Ce mémoire de thèse est composé de 11 chapitres. Ci-dessous nous dressons le bilan par chapitre du travail effectué.

Ch. 1 Dans ce premier chapitre on a introduit des notions relatives au domaine du nucléaire. Ainsi on a illustré brièvement le fonctionnement des «Réacteurs à Eau Pressurisée» appelés REP (ou PWR pour *Pressurized Water Reactor* en anglais), en mettant l'accent sur les principales composantes du cœur. Après avoir introduit le phénomène de la crise d'ébullition, on a expliqué comment la simulation numérique peut être aujourd'hui conçue comme un outil de modélisation et notamment, dans le cadre de la crise d'ébullition, la simulation numérique directe, qui permet d'avoir accès à toutes les grandeurs locales et instantanées. Après cette introduction, on a présenté les grands lignes du modèle de changement de phase liquide-vapeur développé dans ce mémoire de thèse ainsi que la stratégie d'approximation numérique retenue.

Après une brève nomenclature et cette introduction, la thèse est composée de trois parties ainsi structurées.

Première partie : modélisation du changement de phase

Ch. 2 Ce chapitre est consacré à la construction de lois d'état en présence de transitions de phase. Nous commençons par rappeler les concepts de base du changement de phase liquide-vapeur (équation d'état, propriétés thermodynamiques) nécessaires pour la construction d'une loi diphasique à saturation. Nous verrons que l'entropie est la fonction thermodynamique la mieux adaptée pour l'étude de ce genre de phénomènes et que la connaissance de cette fonction dans deux phases distinctes d'un même fluide permet d'établir un modèle complet de transition de phase en considérant l'enveloppe concave de ces deux lois (une application directe sera proposée aux chapitres 5, 6 et 7). On obtiendra ainsi une fonction d'état continue décrivant l'équilibre thermodynamique d'un fluide entre sa phase liquide et sa phase vapeur.

Ch. 3 On s'intéresse par la suite aux propriétés mathématiques de la loi de changement de phase. Ce chapitre porte sur la dynamique des transitions de phase via le système des équations d'Euler. Nous étudierons les propriétés mathématiques de ce système lorsqu'il est fermé par la loi d'état construite au chapitre précédent. Nous verrons d'abord que la vitesse du son, malgré sa discontinuité le long de la courbe de saturation, est toujours réelle et non nulle, ce qui garantit que le système des équations d'Euler est strictement hyperbolique. Nous examinerons ensuite les courbes isentropes (décroissance et convexité) dans le plan d'Amagat car elles constituent la clé pour comprendre la perte d'unicité des solutions entropiques du problème de Riemann.

Ch. 4 Dans ce chapitre on s'intéresse d'abord à la nature et à la définition des solutions faibles du système des équations d'Euler fermé par la loi de changement de phase. On rappelle ensuite quelques points clés à propos de l'existence et de l'unicité des solutions du problème de Riemann associé à ce système.

Ch. 5 Au chapitre 2 nous avons vu comment construire un modèle de transition de phase : il suffit de se donner une entropie pour chaque phase et de les raccorder en utilisant les équations de l'équilibre entre les deux phases. Afin d'illustrer cette démarche, nous construisons à présent un modèle explicite de loi d'état de changement de phase. On considère un fluide susceptible d'exister sous deux phases, chacune étant modélisée par une équation d'état de type «gaz parfait polytropique». La loi d'état de changement de phase est déterminée en résolvant le problème de concavification via la résolution d'un système qui définit l'équilibre entre les deux phases. On obtient ainsi une équation d'état complète. On sait que ce type de loi ne décrit pas de façon satisfaisante les propriétés thermodynamiques des fluides (surtout la phase liquide). Toutefois, le fait de considérer que chaque phase suit une loi de type gaz parfait a un intérêt majeur : la détermination de la loi d'état de changement de phase se réduit à la recherche (numérique) de l'unique racine d'une fonction non linéaire et elle permet une vérification analytique des propriétés de cette loi, notamment la stricte hyperbolicité du système des équations d'Euler.

Ch. 6 Dans ce chapitre on introduit l'équation d'état *Stiffened Gas*. Dans un premier temps on donne les éléments intervenant dans cette loi d'état pour un fluide monphasique. On examine ensuite comment en déduire la loi de changement de phase. Cette loi est définie par un problème de concavification ; on montre d'abord que ce problème peut être ramené à un système de deux équations à deux inconnues qui définit l'équilibre entre les deux phases. On illustre ensuite sous quelles conditions on peut simplifier ultérieurement ce système et, dans les cas pour lesquels cette simplification n'est plus possible, on propose une résolution approchée. On termine en présentant les calculs de la loi d'état de changement de phase pour deux fluides particuliers : l'eau d'abord, le dodécane ensuite.

Ch. 7 Dans ce chapitre on introduit une stratégie générale pour la construction de la loi de changement de phase lorsque les deux phases sont décrites par des données expérimentales. On présente ensuite le calcul de cette loi d'état pour l'eau et le dodécane.

La première partie achève le travail de modélisation. Le modèle d'Euler est dès lors complètement fermé et on peut passer à l'étude de son approximation numérique.

Deuxième partie : approximation numérique

Ch. 8 Pour approcher numériquement le système de changement de phase, nous proposons dans ce chapitre une méthode de relaxation instantanée. Cette méthode permet d'envisager la simulation du système d'Euler avec changement de phase par le biais d'un modèle d'Euler étendu. Suivant la démarche de Caro [21], Caro *et al.* [24], Gavriluk et Gouin [38], Gavriluk et Saurel [39], cette procédure de modélisation s'appuie sur le principe de moindre action avec une définition opportune d'une énergie interne pour le système d'EDP. La modélisation des termes sources de relaxation s'effectue de manière à en rendre positive la production d'entropie. On a alors construit plusieurs sur-systèmes avec des termes sources de relaxation. Parmi tous ces systèmes, celui retenu pour ensuite écrire un schéma numérique est le système à cinq équations avec fermeture isotherme de Allaire *et al.* [1], Kokh [60] avec deux paramètres de relaxation.

Ch. 9 Une méthode numérique est finalement élaborée au chapitre 9. Avant de passer à l'écriture d'un schéma numérique, on introduit d'abord dans le sur-système trois autres phénomènes physiques qui jouent un rôle majeur dans le changement de phase par ébullition nucléée : la gravité, la diffusion de la chaleur et la tension de surface. Une fois le système établi, on présente un schéma classique de décomposition d'opérateurs connus sous le nom de «schéma de relaxation». Dans ce schéma chaque pas de temps est composé de deux étapes : hydrodynamique sans termes sources, puis relaxation des quantités thermodynamiques en maximisant l'entropie du mélange.

Ch. 10 Une fois cette méthode implémentée, plusieurs simulations sont alors réalisées. L'ensemble de ces simulations illustre l'aptitude du modèle et de la méthode à traiter des écoulements liquide-vapeur en changement de phase. On s'intéresse tout d'abord à la validation de cette méthode numérique sur quelques cas tests unidimensionnels. Ce schéma est ensuite appliqué à la simulation d'écoulements liquide-vapeur en 2D (on n'envisage que des maillages cartésiens réguliers). Les deux phases sont par ailleurs décrites toujours par les lois d'état de type *stiffened gas* décrites au chapitre 6. On montre notamment la capacité du modèle de créer des bulles de vapeur dans du liquide pur au niveau d'une paroi chauffée.

Ch. 11 Dans ce dernier chapitre on conclut par quelques considérations générales sur le modèle ainsi que la méthode numérique utilisée et on propose certaines perspectives à court et à plus long terme.

Troisième partie : publications

Dans cette partie on a reporté les deux publications issues des chapitres 2, 3 et 6.

PREMIÈRE PARTIE .

MODÉLISATION DU CHANGEMENT DE PHASE

*D*ANS CETTE PARTIE on définit un modèle de changement de phase. On a vu dans le chapitre introductif que, pour des raisons numériques, il serait intéressant de pouvoir considérer les interfaces liquide-vapeur non pas comme des surfaces de discontinuité mais comme des zones volumiques de transition, dont l'étendue serait de quelques mailles de calcul. Tout le problème consiste alors à savoir comment effectuer cette «transformation» sans changer macroscopiquement le comportement des interfaces ainsi étalées. Il existe plusieurs manières de procéder. Notre point de vue est de se situer au plus près de la physique sans introduire d'artifices ou d'astuces numériques. La démarche que l'on a choisi d'adopter dans ce travail consiste donc à coller le plus longtemps possible à un modèle physique en procédant de la manière suivante : la loi d'état est basée sur l'équilibre thermodynamique et l'écoulement au sein du changement de phase est décrit par le système des équations d'Euler. Une fois le modèle ainsi clairement établi, on passera à sa résolution numérique.

CHAPITRE 2

Loi d'état du changement de phase

2.1 Lois de comportement et hypothèses	28
2.1.1 Définition de loi d'état pour une phase pure	28
2.1.2 Courbe de coexistence et relation de Clapeyron	32
2.1.3 Transitions de phase liquide-vapeur	34
2.2 Loi d'état en transition de phase	35
2.2.1 Loi d'état sans changement de phase	35
2.2.2 Loi d'état avec changement de phase : problème d'optimisation	39
2.2.3 Conditions de compatibilité	47
2.2.4 Loi d'état avec changement de phase : enveloppe concave	49
2.3 Conclusion.	54
Annexes	57
2.A Lien avec le modèle de Van des Waals	57
2.A.1 Équation d'état	57
2.B Transformée de Legendre-Fenchel	63
2.B.1 Principaux potentiels thermodynamiques	67

Résumé

L' OBJECTIF PRINCIPAL de cette thèse est de réaliser des simulations numériques d'ébullition nucléée, c'est-à-dire d'écoulements diphasiques avec transitions de phase. Dans cette optique, sachant que numériquement se créent des zones de mélange (non physiques), on cherche dans un premier temps à définir une loi d'état pour ce mélange tout en respectant la thermodynamique classique.

Dans ce chapitre, on s'intéresse uniquement à la fermeture thermodynamique qui constitue la clef de voûte du problème de l'épaissis-

sement artificiel d'une interface.

Ce chapitre est donc consacré à la construction de lois d'état en présence de transitions de phase.

Nous commençons par rappeler les concepts de base du changement de phase liquide-vapeur (équation d'état, propriétés thermodynamiques, ...) nécessaires pour la construction d'une loi diphasique à saturation. Nous verrons que l'entropie est la fonction thermodynamique la mieux adaptée pour l'étude de ce genre de phénomènes et que la connaissance de cette fonction dans deux phases distinctes d'un même fluide permet d'établir un modèle complet de transition de phase en considérant l'enveloppe concave de ces deux lois (une application directe sera proposée aux chapitres 5, 6 et 7). On obtiendra ainsi une fonction d'état continue décrivant l'équilibre thermodynamique d'un fluide entre sa phase liquide et sa phase vapeur.

2.1. Lois de comportement et hypothèses

Rappelons d'abord brièvement quelques notions de thermodynamique classique qui conduisent notamment à la stricte concavité de l'entropie molaire dont la donnée constitue une équation d'état complète. Nous conclurons par quelques rappels de classification des changements de phase. Sans souci d'exhaustivité, seuls les principaux résultats nécessaires à la construction de la loi d'état de changement de phase (qu'on appellera dorénavant «loi d'état à l'équilibre» ou «loi d'état à saturation») sont rappelés. Pour plus de détails ou pour compléments nous renvoyons le lecteur aux ouvrages de thermodynamique tels ceux de Callen [20] ou de Greiner *et al.* [44].

2.1.1. Définition de loi d'état pour une phase pure

Considérons des transformations quasi-statiques d'un fluide pur dont l'état est décrit par la variable molaire $\mathbf{w} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, \varepsilon)$ qui appartient au cône ouvert convexe de \mathbb{R}^2

$$\mathcal{C} \stackrel{\text{def}}{=} \{\tau > 0, \varepsilon > 0\}, \quad [\text{domaine des états}]$$

où τ et ε sont respectivement le volume et l'énergie interne molaires.

Une *équation d'état complète* est une relation qui exprime l'entropie molaire s d'un matériau en fonction de son volume molaire τ et de son énergie interne molaire ε . On désignera dans la suite $\mathbf{w} \mapsto s(\mathbf{w})$ l'entropie molaire du système. On supposera de plus que s est une fonction de classe \mathcal{C}^2 sur \mathcal{C} . En ce qui concerne les frontières du domaine des états \mathcal{C} , on émet l'hypothèse :

☞ **HYPOTHÈSE 2.1.**

$$\lim_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ \varepsilon > 0}} s(\tau, \varepsilon) = \lim_{\substack{\varepsilon \rightarrow 0 \\ \tau > 0}} s(\tau, \varepsilon) = -\infty. \quad (2.1)$$

En l'absence de risque de confusion pour les dérivées, on adoptera les notations suivantes :

$$s_\varepsilon \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial s}{\partial \varepsilon} \right|_\tau, \quad s_\tau \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_\varepsilon, \quad s_{\varepsilon\varepsilon} \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial^2 s}{\partial \varepsilon^2} \right|_\tau, \quad s_{\tau\tau} \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial^2 s}{\partial \tau^2} \right|_\varepsilon, \quad s_{\tau\varepsilon} \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial^2 s}{\partial \tau \partial \varepsilon} \right|.$$

La température T et la pression P , appelées *équations d'état incomplètes*, sont définies par les dérivées premières de l'entropie selon les relations

$$T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{s_\varepsilon}, \quad P \stackrel{\text{def}}{=} \frac{s_\tau}{s_\varepsilon}. \quad (2.2)$$

Pour que l'entropie vérifie les propriétés thermodynamiques usuelles, on suppose que les dérivées de s vérifient les conditions suivantes.

☞ **HYPOTHÈSE 2.2.** ☞ *La température T et la pression P sont strictement positives, autrement dit l'entropie s est une fonction strictement croissante de ε et τ :*

$$s_\varepsilon > 0, \quad s_\tau > 0, \quad \forall \mathbf{w} \in \mathcal{C}. \quad (2.3)$$

☞ *L'état \mathbf{w} est stable, autrement dit l'entropie s a une matrice hessienne*

$$d^2s \stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} s_{\varepsilon\varepsilon} & s_{\tau\varepsilon} \\ s_{\tau\varepsilon} & s_{\tau\tau} \end{bmatrix}$$

définie négative sur \mathcal{C} , c'est-à-dire que pour tout $\mathbf{w} \in \mathcal{C}$ on a

$$\begin{cases} s_{\varepsilon\varepsilon}s_{\tau\tau} > (s_{\tau\varepsilon})^2, \\ s_{\varepsilon\varepsilon} < 0 \text{ (ou de manière équivalente } s_{\tau\tau} < 0). \end{cases} \quad (2.4a)$$

$$(2.4b)$$

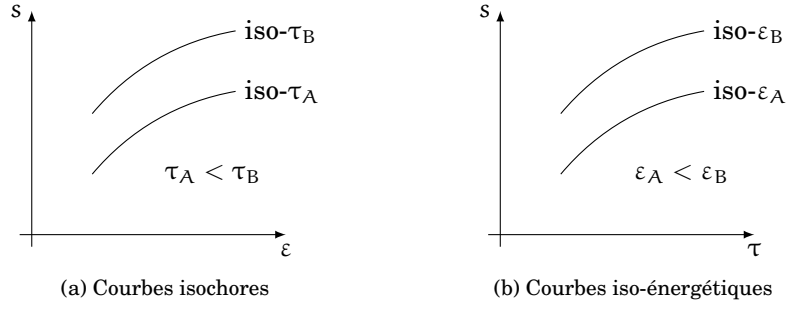
★ **REMARQUE 2.1.** Rappelons que si une fonction $\mathbf{x} \mapsto f(\mathbf{x})$ est deux fois différentiable sur un ouvert convexe $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, alors

1. f est convexe (resp. concave) sur Ω si et seulement si $d^2f(x_0)$ est semi-définie positive (resp. négative) pour tout $x_0 \in \Omega$;
2. si $d^2f(x_0)$ est définie positive (resp. négative) pour tout $x_0 \in \Omega$, alors f est strictement convexe (resp. concave) sur Ω .

Les relations (2.4) impliquent alors que l'entropie $\mathbf{w} \mapsto s(\mathbf{w})$ est une fonction strictement concave. Nous verrons que ce n'est plus le cas lorsque l'on est en présence de deux phases (cf. théorème 2.9 à la page 50) ☘

L'équation d'état $\mathbf{w} \mapsto s$ peut être représentée dans un diagramme (τ, ε, s) par une surface \mathcal{S} (parfois appelée «surface de Gibbs») telle que :

- ☞ si on coupe la surface \mathcal{S} par des plans à τ constant on obtient les courbes isochores. Il ressort des inégalités $s_\varepsilon > 0$ et $s_{\varepsilon\varepsilon} < 0$ les formes de ces courbes comme dans la figure 2.1a à la page suivante ;


 FIG. 2.1.: Coupes de la surface S

✂ coupons maintenant la surface S par des plans à ε constant. On obtient les courbes iso-énergétiques. On a $s_\tau > 0$ et $s_{\tau\tau} < 0$ d'où la figure 2.1b.

Il en résulte ainsi que la surface est entièrement contenue dans le demi-espace, vers les s négatifs, déterminé par le plan tangent en quelque point que ce soit.

★ **REMARQUE 2.2 (LIEN ENTRE $(\tau, \varepsilon) \mapsto s$ ET $(\tau, s) \mapsto \varepsilon$).** Notons que puisque la température, définie à l'équation (2.2), est par hypothèse toujours positive, la relation $(\tau, \varepsilon) \mapsto s$ peut être inversée et se réécrire sous la forme $(\tau, s) \mapsto \varepsilon$, autrement dit la relation $(\tau, s) \mapsto (\tau, \varepsilon)$ est un difféomorphisme local et l'on a les formules de dérivation

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \star}{\partial \tau} \right|_s &= \left. \frac{\partial \star}{\partial \tau} \right|_\varepsilon - P \left. \frac{\partial \star}{\partial \varepsilon} \right|_\tau, \\ \left. \frac{\partial \star}{\partial s} \right|_\tau &= T \left. \frac{\partial \star}{\partial \varepsilon} \right|_\tau. \end{aligned}$$

En on déduit les formules suivantes

$$\begin{aligned} s_\varepsilon &= \frac{1}{T} = \frac{1}{\varepsilon_s} > 0, & \varepsilon_s &= T = \frac{1}{s_\varepsilon} > 0, \\ s_\tau &= \frac{P}{T} = -\frac{\varepsilon_\tau}{\varepsilon_s} > 0, & \varepsilon_\tau &= -P = -\frac{s_\tau}{s_\varepsilon} < 0. \end{aligned}$$

Grâce à cette propriété d'inversibilité, tout ce que l'on dira dans ce chapitre à propos de la fonction $(\tau, \varepsilon) \mapsto s$ pourra être facilement transposé pour la fonction $(\tau, s) \mapsto \varepsilon$.

Par des calculs élémentaires on peut montrer que les dérivées secondes de s par rapport à τ et ε s'expriment en fonction des dérivées secondes de ε par rapport à s et τ (et réciproquement). En ce qui concerne les matrices hessiennes on a donc

$$\begin{aligned} s_{\varepsilon\varepsilon} &= -\frac{1}{T^3} \varepsilon_{ss}, & \varepsilon_{ss} &= -T^3 s_{\varepsilon\varepsilon}, \\ s_{\varepsilon\tau} &= -\frac{1}{T^3} (P \varepsilon_{s\tau} + T \varepsilon_{s\tau}), & \varepsilon_{s\tau} &= T^2 (P s_{\varepsilon\varepsilon} - s_{\varepsilon\tau}), \\ s_{\tau\tau} &= -\left(\frac{1}{T} \varepsilon_{\tau\tau} + 2 \frac{P}{T^2} \varepsilon_{s\tau} + \frac{P^2}{T^3} \varepsilon_{ss} \right), & \varepsilon_{\tau\tau} &= -T (P^2 s_{\varepsilon\varepsilon} - 2P s_{\varepsilon\tau} + s_{\tau\tau}). \quad \clubsuit \end{aligned}$$

De plus, on a le résultat suivant :

► **PROPOSITION 2.1:**

La loi d'état $(\tau, s) \mapsto \varepsilon$ a une matrice hessienne semi-définie positive (resp. positive) si et seulement si la loi d'état $(\tau, \varepsilon) \mapsto s$ a une matrice hessienne semi-définie négative (resp. négative). \diamond

PREUVE.

Soit $\mathbf{v} \stackrel{\text{def}}{=} (v_1, v_2)^t$ un vecteur de \mathbb{R}^2 ; on a

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^t d^2 \varepsilon \mathbf{v} &= (v_1, v_2) \begin{pmatrix} \varepsilon_{ss} & \varepsilon_{s\tau} \\ \varepsilon_{s\tau} & \varepsilon_{\tau\tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \\ &= v_1^2 \varepsilon_{ss} + 2v_1 v_2 \varepsilon_{s\tau} + v_2^2 \varepsilon_{\tau\tau} = \\ &= v_1^2 (-T^3 s_{\varepsilon\varepsilon}) + 2v_1 v_2 (T^2 (P s_{\varepsilon\varepsilon} - s_{\varepsilon\tau})) + v_2^2 (-T (P^2 s_{\varepsilon\varepsilon} - 2P s_{\varepsilon\tau} + s_{\tau\tau})) = \\ &= -T (v_1 T + v_2 P, v_2) \begin{pmatrix} s_{\varepsilon\varepsilon} & s_{\varepsilon\tau} \\ s_{\varepsilon\tau} & s_{\tau\tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 T + v_2 P \\ v_2 \end{pmatrix} = \\ &= -T (v_1 T + v_2 P, v_2) d^2 s \begin{pmatrix} v_1 T + v_2 P \\ v_2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

L'hypothèse 2.2 à la page 29 implique alors que

$$\mathbf{v}^t d^2 \varepsilon \mathbf{v} \geq 0 \text{ ssi } \mathbf{u}^t d^2 s \mathbf{u} \leq 0 \text{ pour tout } \mathbf{v}, \mathbf{u} \in \mathbb{R}^2;$$

$$\mathbf{v}^t d^2 \varepsilon \mathbf{v} > 0 \text{ ssi } \mathbf{u}^t d^2 s \mathbf{u} < 0 \text{ pour tout } \mathbf{v}, \mathbf{u} \in \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}. \quad \blacklozenge$$

Enfin on introduit l'enthalpie libre g (appelée aussi potentiel de Gibbs ou encore potentiel chimique). Elle est définie comme la transformée de Legendre de l'énergie interne ε , soit

$$\sup_{\tau, s > 0} \{-P\tau + Ts - \varepsilon(\tau, s)\}$$

(pour plus de détails voir l'annexe 2.B à la page 63). Sa différentielle s'écrit donc

$$dg = \tau dP - s dT. \quad (2.5)$$

Lorsque $(\tau, s) \mapsto \varepsilon$ a une matrice hessienne positive, la relation $(\tau, s) \mapsto (P, T)$ est un changement de variable local (voir la remarque 2.7 à la page 74). On a alors simplement

$$g = \varepsilon + P\tau - Ts$$

et la relation de Gibbs

$$ds = \frac{P}{T} d\tau + \frac{1}{T} d\varepsilon.$$

On verra que ceci n'est plus le cas lors des changements de phase car la hessienne de $(\tau, s) \mapsto \varepsilon$ est seulement semi-définie positive.

Les propriétés thermodynamiques rappelées ci-dessus sont fréquemment utilisées dans la littérature et de nombreuses lois d'état les satisfont. Au chapitre 5 on verra par exemple que la loi d'état de type gaz parfait polytropique vérifie ces hypothèses de même que la loi *stiffened gas* (chapitre 6).

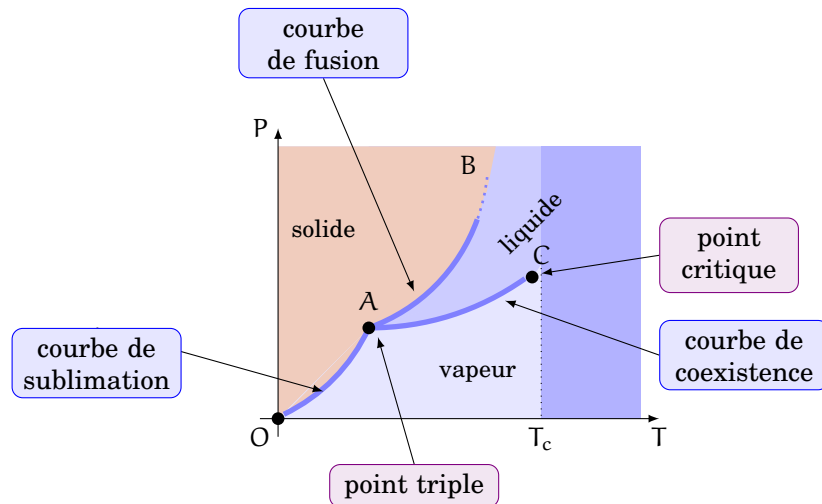


FIG. 2.2.: Diagramme de phase (pour le diagramme de l'eau, dans lequel la pente de la courbe de fusion est négative, voir par exemple Greiner *et al.* [44, page 66])

2.1.2. Courbe de coexistence et relation de Clapeyron

Considérons une quantité donnée de fluide et regardons le graphique des trois fonctions

- ☛ pression de saturation $(\tau, T) \mapsto P^{\text{sat}}$,
- ☛ pression de fusion $(\tau, T) \mapsto P^{\text{fus}}$ et
- ☛ pression de sublimation $(\tau, T) \mapsto P^{\text{subl}}$

à une valeur de τ donnée. Ces courbes séparent le plan (T, P) en régions isolant les états où le fluide est un gaz, un liquide ou un solide (cf. figure 2.2).

- ☛ Le point B est à l'infini : la courbe AB n'est pas bornée.
- ☛ Le point C, appelé *point critique*, est un point réel, la courbe AC se terminant en ce point.
- ☛ Sous la courbe OA, on est à l'état gazeux et au dessus, à l'état solide. Sur la courbe, solide et gaz sont en équilibre, c'est la *courbe de sublimation*.
- ☛ En haut de la courbe AB ($B \rightarrow \infty$), on a l'état solide et en dessous liquide, la courbe elle-même étant la *courbe de fusion* des états dans lesquels cohabitent liquide et solide. Relâchant la contrainte sur la quantité de fluide, cette courbe devient une surface dans le graphique complet (τ, T, P) .
- ☛ Au dessus de la courbe AC se trouvent les états de liquide et au dessous les états du gaz. Pour des températures plus élevées que T_c , nous avons généralement un gaz humide. Relâchant la contrainte sur la quantité de fluide, la courbe devient une surface dans le graphique complet (τ, T, P) .
- ☛ On note qu'au point A se retrouvent le gaz, le liquide et le solide en équilibre : c'est le *point triple*. Dans le graphique complet, si on ne contrôle pas tous les volumes de phase, ce point génère une courbe.

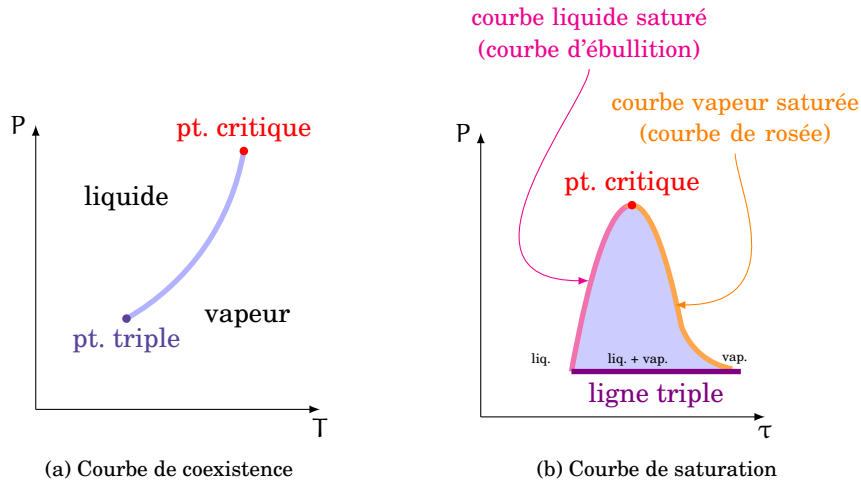


FIG. 2.3.: Courbes de coexistence et de saturation

Concentrons nous maintenant sur la portion relative aux changements de phase liquide-vapeur. On a la définition suivante.

☞ **DÉFINITION 2.1. Courbe de coexistence :** à une valeur de τ donnée, le graphique de la fonction $T \mapsto P^{\text{sat}}$ sépare le plan (T, P) en régions isolant les états où le fluide est un gaz ou un liquide. Cette courbe est appelée «courbe de coexistence» car le long de cette courbe les deux phases du fluide coexistent ; ainsi à une température donnée deux phases distinctes d'un même corps pur ne coexistent qu'à une pression déterminée (voir figure 2.3a).

Courbe de saturation : dans le plan (τ, P) la courbe de saturation sépare les régions où le fluide est une phase pure (liquide ou vapeur) de la région où les deux phases coexistent. Selon qu'elle soit à gauche ou à droite du point critique, on parle de courbe d'ébullition ou de courbe de rosée (voir figure 2.3b) :

Courbe de rosée : portion de la courbe de saturation située à droite du point critique (entre la phase vapeur et la zone de coexistence),

Courbe d'ébullition : portion de la courbe de saturation située à gauche du point critique (entre la phase liquide et la zone de coexistence).

L'ensemble des états délimités par la courbe de saturation est dit «dôme» ou «cloche» de saturation et ces états sont dits «états saturés» ou «à saturation» ou encore «état de mélange à l'équilibre».

En particulierisant deux états A et A' d'une même isotherme-isobare dans le plan (τ, P) , on a la relation de Clapeyron qui fournit la pente de la courbe de coexistence (figure 2.4 à la page suivante) :

$$\frac{dP^{\text{sat}}}{dT} = \frac{s(A') - s(A)}{\tau(A') - \tau(A)}. \quad (2.6)$$

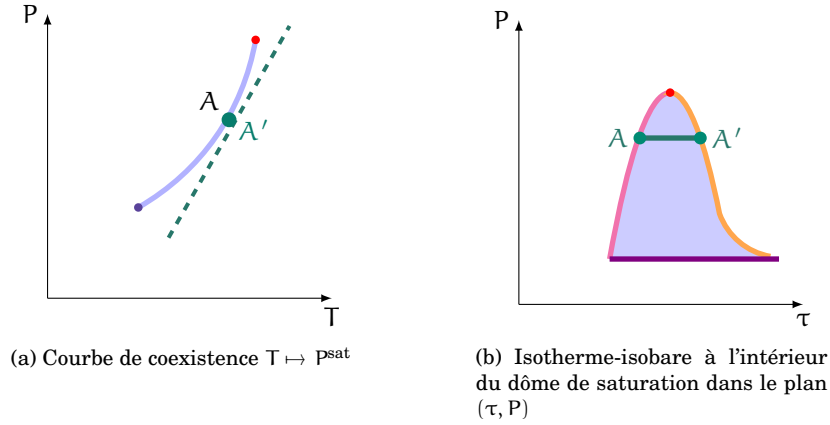


FIG. 2.4.: Isothermes et courbe de coexistence

Cette équation peut être mise en relation avec la chaleur latente ℓ car $\ell = T(s(A') - s(A))$ (voir par exemple Callen [20]) et on en déduit la relation de Clausius-Clapeyron

$$\frac{dP^{\text{sat}}}{dT} = \frac{\ell}{T(\tau(A') - \tau(A))}. \quad (2.7)$$

2.1.3. Transitions de phase liquide-vapeur

Parmi les transitions de phase il existe différentes classifications, par exemple celle de Ehrenfest ou de Tisza¹. Bien qu'elles présentent des différences entre elles, toutes ces classifications concordent en affirmant que les transitions de phase qui traversent la courbe de coexistence sont des transitions dites «du premier ordre», selon la définition suivante.

☞ **DÉFINITION 2.2.** Une transition de phase est du premier ordre si elle se fait à température et pression constantes avec chaleur latente. Elle est caractérisée par la **discontinuité** entre les deux phases de l'**entropie** molaire s , du **volume** molaire τ et de l'**énergie interne** molaire ε (cf. Callen [20, p. 228], Matolcsi [78]).

Une transition de phase liquide-vapeur, étant une transition du premier ordre, est donc caractérisée par ces discontinuités. Par ailleurs, il est bien connu qu'à saturation le liquide est plus dense que sa vapeur. Puisqu'il y a de la chaleur latente, de l'équation de Clausius-Clapeyron (2.7) on déduit que, toujours à saturation, l'entropie du liquide est plus petite que l'entropie de la vapeur. Enfin, en regardant les valeurs expérimentales à saturation on observe que, pour la plupart des substances², l'énergie interne du liquide est plus petite que celle de la vapeur. Dorénavant on fera l'hypothèse suivante :

¹Pour plus de détails sur la classification des changements de phase on pourra consulter par exemple les ouvrages de Annamalai et Puri [3], Callen [20], Greiner *et al.* [44], Matolcsi [78].

²Les valeurs expérimentales à saturation de l'eau ont été reportées à la table 7.5 à la page 208 et représentées à la figure 7.3 à la page 214. Pour d'autres substances on pourra consulter Lemmon *et al.* [69].

☞ **HYPOTHÈSE 2.3.** À saturation, c'est à dire sur la courbe de coexistence $T \mapsto p^{\text{sat}}$, on suppose que

$$\begin{aligned}\tau^{\text{liq}}(T, p^{\text{sat}}(T)) &< \tau^{\text{vap}}(T, p^{\text{sat}}(T)), \\ \varepsilon^{\text{liq}}(T, p^{\text{sat}}(T)) &< \varepsilon^{\text{vap}}(T, p^{\text{sat}}(T)), \\ s^{\text{liq}}(T, p^{\text{sat}}(T)) &< s^{\text{vap}}(T, p^{\text{sat}}(T)).\end{aligned}$$

On remarque que, pour cohérence avec la définition 2.2, le point critique doit être considéré comme appartenant à la partie du plan (ε, τ, s) des transitions de phase du second ordre (voir notamment Matolcsi [78]).

De simples calculs montrent que l'hypothèse 2.3 est équivalente à la suivante où, sur la courbe de coexistence, on a

$$\begin{aligned}\tau^{\text{liq}}(T, p^{\text{sat}}(T)) &< \tau^{\text{vap}}(T, p^{\text{sat}}(T)), \\ \varepsilon^{\text{liq}}(T, p^{\text{sat}}(T)) &< \varepsilon^{\text{vap}}(T, p^{\text{sat}}(T)), \\ h^{\text{liq}}(T, p^{\text{sat}}(T)) &< h^{\text{vap}}(T, p^{\text{sat}}(T)).\end{aligned}$$

2.2. Loi d'état en transition de phase

Dans cette partie nous allons construire l'équation d'état du changement de phase. Pour cela on considère un fluide continu composé de deux phases, chacune étant modélisée par sa propre loi d'état. Nous définissons la loi d'état en transition de phase comme la solution d'un problème d'optimisation qui décrit l'équilibre thermodynamique d'un fluide entre sa phase liquide et sa phase vapeur. Nous faisons ensuite le lien avec une autre définition basée sur le principe que le changement de phase a lieu lorsque l'entropie globale du fluide, construite à partir de ces deux lois d'état, perd sa propriété de concavité (on s'appuiera ici sur les ouvrages classiques de thermodynamique, notamment celui de Callen [20]). Cela nous conduira à la proposition 2.9 et à l'écriture d'un système qui décrit un triple équilibre isotherme isobare équipotentiel entre la phase liquide et la phase vapeur d'un même fluide.

2.2.1. Loi d'état sans changement de phase

Pour décrire le changement de phase, deux lois de comportement doivent tout d'abord être introduites, ces deux lois caractérisant les propriétés thermodynamiques de chaque phase.

Considérons un système thermodynamique constitué de deux fluides $\alpha = 1, 2$ représentant la phase vapeur et la phase liquide. Chaque phase est équipée d'une équation d'état complète

$$s_\alpha : \mathbf{w}_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} (\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \mapsto s_\alpha,$$

où τ_α , ε_α et s_α dénotent respectivement le volume, l'énergie interne et l'entropie molaires de la phase α . Dans la suite on supposera que les deux entropies s_α sont de

classe \mathcal{C}^2 et vérifient les inégalités de monotonie (2.3) et de concavité (2.4). Par exemple, les entropies s_α peuvent correspondre aux deux branches stables de la loi de Van der Waals (cf. annexe 2.A à la page 57).

La composition du système est caractérisée par la fraction de masse de la phase 1, notée y , appartenant à l'intervalle fermé $[0, 1]$:

$$\left| \begin{array}{l} y = 1 \text{ identifie la phase 1,} \\ y = 0 \text{ identifie la phase 2,} \\ y \in]0, 1[\text{ correspond à un mélange des deux phases.} \end{array} \right.$$

Dorénavant on notera

$$y_1 \stackrel{\text{def}}{=} y \quad \text{et} \quad y_2 \stackrel{\text{def}}{=} (1 - y). \quad (2.8)$$

On note $\mathbf{w} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, \varepsilon) \in \mathcal{C}$ le volume et l'énergie interne molaires du système thermodynamique global.

☞ **DÉFINITION 2.3.** On définit l'ensemble $\mathcal{Q}(\mathbf{w})$ comme celui des quadruplets $(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y_1, y_2)$ tels que

- ❶ $1 = y_1 + y_2$,
- ❷ $\mathbf{w} = y_1 \mathbf{w}_1 + y_2 \mathbf{w}_2$.

On rappelle que $\lim_{\substack{\tau_\alpha \rightarrow 0 \\ \varepsilon_\alpha > 0}} s_\alpha(\cdot, \varepsilon_\alpha) = \lim_{\substack{\varepsilon_\alpha \rightarrow 0 \\ \tau_\alpha > 0}} s_\alpha(\tau_\alpha, \cdot) = -\infty$.

☞ **DÉFINITION 2.4 (ENTROPIE SANS CHANGEMENT DE PHASE σ).** Suivant la thermodynamique classique (voir par exemple Callen [20]) on définit une entropie pour un mélange de deux phases non-miscibles (dite «entropie hors équilibre») comme

$$\sigma(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y_1, y_2) \stackrel{\text{def}}{=} y_1 s_1(\mathbf{w}_1) + y_2 s_2(\mathbf{w}_2), \quad (2.9)$$

avec $(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y_1, y_2) \in \mathcal{C} \times \mathcal{C} \times [0, 1] \times [0, 1]$.

Pour τ et ε strictement positifs, on introduit les fractions de volume et d'énergie ainsi définies

$$z \stackrel{\text{def}}{=} y \frac{\tau_1}{\tau} \quad \text{et} \quad \psi \stackrel{\text{def}}{=} y \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon} \quad \text{avec} \quad z, \psi \in [0, 1].$$

On remarque que $y = 0$ (resp. 1) si et seulement si $z = \psi = 0$ (resp. 1). En notant $\mathbf{Y} \stackrel{\text{def}}{=} (y, z, \psi)$ le vecteur des fractions de masse, de volume et d'énergie et en posant

$$\mathcal{T} \stackrel{\text{def}}{=} \{\mathbf{Y} \mid 0 \leq y \leq 1, 0 \leq z \leq 1, 0 \leq \psi \leq 1\},$$

la définition 2.4 se réécrit comme suit :

☞ **DÉFINITION 2.5 (ENTROPIE SANS CHANGEMENT DE PHASE $\tilde{\sigma}$).**

$$\tilde{\sigma}(y, z, \psi, \mathbf{w}) = \begin{cases} s_\alpha(\mathbf{w}), & \text{si } \mathbf{Y} \in \partial \mathcal{T}, \\ y s_1\left(\frac{z}{y}\tau, \frac{\psi}{y}\varepsilon\right) + (1-y)s_2\left(\frac{1-z}{1-y}\tau, \frac{1-\psi}{1-y}\varepsilon\right), & \text{si } \mathbf{Y} \in \overset{\circ}{\mathcal{T}}. \end{cases} \quad (2.10)$$

Remarquons que, puisque les deux entropies monophasiques s_α sont concaves et de classe \mathcal{C}^2 , alors $\tilde{\sigma}$ aussi est de classe \mathcal{C}^2 .

Variables volumiques Souvent en thermodynamique il est plus simple et intuitif de travailler avec les variables volumiques. Si on note $V_\alpha \geq 0$, $E_\alpha \geq 0$, $M_\alpha \geq 0$ et $S_\alpha \geq 0$ respectivement le volume, l'énergie interne, la masse et l'entropie volumiques de la phase α , en posant

$$\mathbf{Y}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{Y} \quad \text{et} \quad \mathbf{Y}_2 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{1} - \mathbf{Y},$$

on définit ces quantités par

$$V_\alpha = z_\alpha \tau = y_\alpha \tau_\alpha, \quad E_\alpha = \psi_\alpha \varepsilon = y_\alpha \varepsilon_\alpha, \quad M_\alpha = y_\alpha$$

et on obtient ainsi

$$(V_\alpha, E_\alpha, M_\alpha) \mapsto S_\alpha = y_\alpha s_\alpha.$$

Posons $\mathbf{W}_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} (V_\alpha, E_\alpha)$; d'après la thermodynamique les fonctions entropies volumiques doivent satisfaire l'hypothèse suivante.

☞ **HYPOTHÈSE 2.4.** L'entropie $(\mathbf{W}_\alpha, M_\alpha) \mapsto S_\alpha$

☞ est nulle en zéro

$$S_\alpha(\mathbf{0}, 0) = 0;$$

☞ est positivement homogène de degré 1, c'est-à-dire

$$S_\alpha(\lambda(\mathbf{W}_\alpha, M_\alpha)) = \lambda S_\alpha(\mathbf{W}_\alpha, M_\alpha), \quad \text{pour tout } \lambda > 0;$$

☞ est concave par rapport à $(\mathbf{W}_\alpha, M_\alpha)$.

Cette hypothèse est équivalente à dire que S_α est sous-linéaire.

★ **REMARQUE 2.3.** En appliquant le théorème d'Euler sur les fonctions homogènes à nos entropies volumiques on a la relation suivante

$$\nabla S_\alpha(\mathbf{W}_\alpha, y_\alpha) \cdot (\mathbf{W}_\alpha, y_\alpha) = S_\alpha(\mathbf{W}_\alpha, y_\alpha),$$

c'est-à-dire

$$\frac{\partial S_\alpha}{\partial V_\alpha} \Big|_{E_\alpha, y_\alpha} V_\alpha + \frac{\partial S_\alpha}{\partial E_\alpha} \Big|_{V_\alpha, y_\alpha} E_\alpha + \frac{\partial S_\alpha}{\partial y_\alpha} \Big|_{V_\alpha, E_\alpha} y_\alpha = S_\alpha(V_\alpha, E_\alpha, y_\alpha).$$

Ce qui donne

$$\frac{P_\alpha}{T_\alpha} V_\alpha + \frac{1}{T_\alpha} E_\alpha + \frac{\partial S_\alpha}{\partial y_\alpha} \Big|_{V_\alpha, E_\alpha} y_\alpha = S_\alpha(V_\alpha, E_\alpha, y_\alpha),$$

c'est-à-dire, pour $y_\alpha \neq 0$,

$$\left. \frac{\partial S_\alpha}{\partial y_\alpha} \right|_{V_\alpha, E_\alpha} = -\frac{1}{y_\alpha} \frac{g_\alpha}{T_\alpha} < 0.$$

Donc $S_\alpha(\mathbf{W}_\alpha, \cdot)$ est décroissante en y_α . ✿

On redéfinit alors l'entropie hors équilibre avec les variables volumiques comme suit :

☞ **DÉFINITION 2.6 (ENTROPIE SANS CHANGEMENT DE PHASE $\hat{\sigma}$).** Soit $\mathbf{W} \stackrel{\text{def}}{=} (V, E)$ un état quelconque. On pose

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, y_1, y_2) &\stackrel{\text{def}}{=} y_1 s_1 \left(\frac{V_1}{y_1}, \frac{E_1}{y_1} \right) + y_2 s_2 \left(\frac{V_2}{y_2}, \frac{E_2}{y_2} \right) = \\ &= S_1(\mathbf{W}_1, y_1) + S_2(\mathbf{W}_2, y_2) \end{aligned} \quad (2.11)$$

avec $(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, y_1, y_2)$ appartenant à l'ensemble

$$\mathcal{Q}''(\mathbf{W}) \stackrel{\text{def}}{=} \{ (\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, y_1, y_2) \in \mathbb{R}_+^2 \times \mathbb{R}_+^2 \times [0, 1] \times [0, 1] \mid \mathbf{W}_1 + \mathbf{W}_2 = \mathbf{W}, y_1 + y_2 = 1 \}$$

ou encore

$$\hat{\sigma}(\mathbf{W}, \mathbf{W}_1, y) \stackrel{\text{def}}{=} S_1(\mathbf{W}_1, y) + S_2(\mathbf{W} - \mathbf{W}_1, 1 - y). \quad (2.12)$$

avec (\mathbf{W}_1, y) appartenant à l'ensemble

$$\mathcal{Q}'(\mathbf{W}) \stackrel{\text{def}}{=} \{ (\mathbf{W}_1, y) \in \mathbb{R}_+^2 \times [0, 1] \mid 0 \leq V_1 \leq V, 0 \leq E_1 \leq E, 0 \leq y \leq 1 \}.$$

Grâce à l'hypothèse 2.4 on a la proposition suivante.

☞ **PROPOSITION 2.2 (HELLUY (46, PAGE 42)):**

- ① L'application $(z\tau, y, \psi\varepsilon, \tau, \varepsilon) \mapsto \tilde{\sigma}$ est concave.
- ② Pour tout (τ, ε) fixé, l'application $(z, y, \psi) \mapsto \tilde{\sigma}$ est concave.
- ③ Pour tout (z, y, ψ) fixé, l'application $(\tau, \varepsilon) \mapsto \tilde{\sigma}$ est concave.
- ④ L'application $(z, y, \psi, \tau, \varepsilon) \mapsto \tilde{\sigma}$ n'est pas concave. ◇

Helluy [46, page 41] a aussi remarqué que les dérivées par rapport à τ et à ε de $\tilde{\sigma}$ permettent de définir, au moins formellement, une température T^{he} et une pression P^{he} pour le mélange sans changement de phase (dit aussi mélange «hors équilibre») :

$$(\tau, \varepsilon, z, y, \psi) \mapsto \begin{cases} \frac{P^{\text{he}}}{T^{\text{he}}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \tilde{\sigma}}{\partial \tau} = y \frac{\partial s_1}{\partial \tau_1} \frac{z}{y} + (1 - y) \frac{\partial s_2}{\partial \tau_2} \frac{1-z}{1-y} = z \frac{P_1}{T_1} + (1 - z) \frac{P_2}{T_2}, \\ \frac{1}{T^{\text{he}}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \tilde{\sigma}}{\partial \varepsilon} = y \frac{\partial s_1}{\partial \varepsilon_1} \frac{\psi}{y} + (1 - y) \frac{\partial s_2}{\partial \varepsilon_2} \frac{1-\psi}{1-y} = \psi \frac{1}{T_1} + (1 - \psi) \frac{1}{T_2}. \end{cases}$$

Donc elles sont données par

$$T^{\text{he}} = \frac{1}{\frac{\psi}{T_1} + \frac{1-\psi}{T_2}},$$

$$P^{\text{he}} = T^{\text{he}} \left(z \frac{P_1}{T_1} + (1-z) \frac{P_2}{T_2} \right) = \frac{z \frac{P_1}{T_1} + (1-z) \frac{P_2}{T_2}}{\frac{\psi}{T_1} + \frac{1-\psi}{T_2}}.$$

Lorsque $y, z, \psi \rightarrow 0$ (resp. 1) on a $(T, P)^{\text{he}} \rightarrow (T, P)_1$ (resp. $(T, P)_2$) : la pression et la température du mélange sans changement de phase sont donc continues.

Dans la prochaine section on verra que la maximisation (sous contraintes) de cette quantité σ (ou de $\tilde{\sigma}$ ou encore de $\hat{\sigma}$ ou $\hat{\hat{\sigma}}$) permet de définir l'entropie avec changement de phase.

2.2.2. Loi d'état avec changement de phase : problème d'optimisation

En accord avec le second principe de la thermodynamique, pour un état global du système thermodynamique donné $\mathbf{w} = (\tau, \varepsilon) \in \mathcal{C}$, les paramètres de composition à l'équilibre $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y_1^*, y_2^*)$ (ou de manière équivalente (y^*, z^*, ψ^*)) sont ceux qui maximisent la fonction $(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y_1, y_2) \mapsto \sigma$ dans $\mathcal{Q}(\mathbf{w})$ (ou de manière équivalente la fonction $(y, z, \psi) \mapsto \sigma(y, z, \psi, \mathbf{w})$ dans \mathcal{T}).

D'après Barberon et Helluy [10], si on suppose que le fluide rejoint toujours instantanément l'équilibre, alors on dote le système d'une nouvelle définition d'entropie (dite «entropie à l'équilibre» ou «entropie à saturation»), que l'on note $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$, ainsi définie :

☞ **DÉFINITION 2.7.** La loi d'état de changement de phase est définie par la maximisation de l'entropie hors équilibre (2.9)

$$s^{\text{eq}}(\mathbf{w}) \stackrel{\text{def}}{=} \max_{\mathcal{Q}(\mathbf{w})} \sigma(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y_1, y_2), \quad (2.13)$$

ou, de manière équivalente, de l'entropie hors équilibre (2.10)

$$s^{\text{eq}}(\mathbf{w}) = \max_{\mathcal{T}} \tilde{\sigma}(y, z, \psi, \mathbf{w}). \quad (2.14)$$

Dans la suite, pour ne pas alourdir les notations, au lieu de noter P^{eq} et T^{eq} la pression et la température définies à partir de l'entropie à saturation s^{eq} , on continuera à les noter P et T .

⇒ **PROPOSITION 2.3:**

Soit $(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y_1, y_2) \mapsto \sigma$ l'entropie hors équilibre (2.9) et soit $\mathbf{w} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, \varepsilon) \in \mathcal{C}$ un état thermodynamique donné.

- ❶ Si $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \overset{\circ}{\mathcal{Q}}(\mathbf{w})$ (intérieur de $\mathcal{Q}(\mathbf{w})$) est solution du problème d'optimisation (2.13) alors l'état $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y_1^*, y_2^*)$ est dit état de mélange à l'équilibre et

on a

$$(T_1, P_1, g_1)(\mathbf{w}_1^*) = (T_2, P_2, g_2)(\mathbf{w}_2^*). \quad (2.15)$$

② Réciproquement, s'il existe un triplet $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \mathcal{Q}(\mathbf{w})$ tel que

$$(T_1, P_1, g_1)(\mathbf{w}_1^*) = (T_2, P_2, g_2)(\mathbf{w}_2^*),$$

alors $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y_1^*, y_2^*)$ est solution du problème d'optimisation (2.13). \diamond

PREUVE.

① Si $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \mathcal{Q}(\mathbf{w})$ est solution du problème d'optimisation (2.13), alors il existe un triplet $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ de réels telle que, pour $\alpha = 1, 2$,

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma}{\partial \tau_\alpha} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i \frac{\partial F_i}{\partial \tau_\alpha}, \\ \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon_\alpha} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i \frac{\partial F_i}{\partial \varepsilon_\alpha}, \\ \frac{\partial \sigma}{\partial y_\alpha} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i \frac{\partial F_i}{\partial y_\alpha}, \end{cases}$$

ayant noté

$$\begin{cases} F_1(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y_1, y_2) \stackrel{\text{def}}{=} y_1 + y_2 - 1, \\ F_2(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y_1, y_2) \stackrel{\text{def}}{=} y_1 \tau_1 + y_2 \tau_2 - \tau, \\ F_3(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y_1, y_2) \stackrel{\text{def}}{=} y_1 \varepsilon_1 + y_2 \varepsilon_2 - \varepsilon. \end{cases}$$

Or, on a

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma}{\partial \tau_\alpha} = y_\alpha \frac{\partial s_\alpha}{\partial \tau_\alpha} = y_\alpha \frac{P_\alpha}{T_\alpha}, \\ \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon_\alpha} = y_\alpha \frac{\partial s_\alpha}{\partial \varepsilon_\alpha} = y_\alpha \frac{1}{T_\alpha}, \\ \frac{\partial \sigma}{\partial y_\alpha} = s_\alpha = \frac{P_\alpha}{T_\alpha} \tau_\alpha + \frac{1}{T_\alpha} \varepsilon_\alpha - \frac{g_\alpha}{T_\alpha}, \\ \sum_{i=1}^3 \lambda_i \frac{\partial F_i}{\partial \tau_\alpha} = \lambda_2 y_\alpha, \\ \sum_{i=1}^3 \lambda_i \frac{\partial F_i}{\partial \varepsilon_\alpha} = \lambda_3 y_\alpha, \\ \sum_{i=1}^3 \lambda_i \frac{\partial F_i}{\partial y_\alpha} = \lambda_1 + \lambda_2 \tau_\alpha + \lambda_3 \varepsilon_\alpha. \end{cases}$$

On obtient donc

$$\begin{cases} \lambda_2 = \frac{P_\alpha}{T_\alpha}, \\ \lambda_3 = \frac{1}{T_\alpha}, \\ \frac{P_\alpha}{T_\alpha} \tau_\alpha + \frac{1}{T_\alpha} \varepsilon_\alpha - \frac{g_\alpha}{T_\alpha} = \lambda_1 + \lambda_2 \tau_\alpha + \lambda_3 \varepsilon_\alpha, \end{cases}$$

d'où

$$\left(\frac{1}{T_1}, \frac{P_1}{T_1}, \frac{g_1}{T_1} \right) (\mathbf{w}_1^*) = \left(\frac{1}{T_2}, \frac{P_2}{T_2}, \frac{g_2}{T_2} \right) (\mathbf{w}_2^*).$$

② Soit $\mathbf{w} \in \mathcal{C}$ un état de mélange donné et considérons un état $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \mathcal{Q}(\mathbf{w})$ tel que

$$(T_1, P_1, g_1)(\mathbf{w}_1^*) = (T_2, P_2, g_2)(\mathbf{w}_2^*). \quad (2.16)$$

Puisque

$$\begin{aligned} 1 &= y_1 + y_2, \\ \varepsilon &= y_1 \varepsilon_1 + y_2 \varepsilon_2, \\ \tau &= y_1 \tau_1 + y_2 \tau_2, \end{aligned}$$

alors

$$\begin{aligned} 0 &= dy_1 + dy_2, \\ d\varepsilon = 0 &= dy_1 \varepsilon_1 + y_1 d\varepsilon_1 + dy_2 \varepsilon_2 + y_2 d\varepsilon_2, \\ d\tau = 0 &= dy_1 \tau_1 + y_1 d\tau_1 + dy_2 \tau_2 + y_2 d\tau_2, \end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned} dy_2 &= -dy_1, \\ (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) dy_1 &= y_1 d\varepsilon_1 + y_2 d\varepsilon_2, \\ (\tau_2 - \tau_1) dy_1 &= y_1 d\tau_1 + y_2 d\tau_2. \end{aligned}$$

Donc, puisqu'en $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y_1^*, y_2^*)$ on a (2.16), la différentielle totale de σ s'écrit

$$\begin{aligned} d\sigma &= s_1 dy_1 + s_2 dy_2 + y_1 \left(\frac{1}{T_1} d\varepsilon_1 + \frac{P_1}{T_1} d\tau_1 \right) + y_2 \left(\frac{1}{T_2} d\varepsilon_2 + \frac{P_2}{T_2} d\tau_2 \right) = \\ &= (s_1 - s_2) dy_1 + \frac{1}{T_1} (y_1 d\varepsilon_1 + y_2 d\varepsilon_2) + \frac{P_1}{T_1} (y_1 d\tau_1 + y_2 d\tau_2) = \\ &= (s_1 - s_2) dy_1 + \frac{1}{T_1} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) dy_1 + \frac{P_1}{T_1} (\tau_2 - \tau_1) dy_1 = \\ &= \left(\frac{g_2}{T_2} - \frac{g_1}{T_1} \right) dy_1, \end{aligned}$$

on a alors $d\sigma(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y_1^*, y_2^*) = 0$. L'ensemble $\mathcal{Q}(\mathbf{w})$ étant un ouvert borné et σ une fonction concave, alors $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y_1^*, y_2^*)$ est un point de maximum et donc solution du problème d'optimisation (2.13). ♦

Notons que cette proposition ne concerne que les états de mélange à l'équilibre. En effet, si \mathbf{w} correspond à un état monophasique, le problème d'optimisation (2.13) n'est plus bien posé : par exemple si $y_1^* = 1$ alors $y_2^* = 0$ et $\mathbf{w}_1^* = \mathbf{w}$, mais \mathbf{w}_2^* n'est pas défini de manière univoque ; de même si on échange les indices 1 et 2.

Pour pallier à ce problème il suffit de travailler avec les *variables volumiques* et réécrire le problème d'optimisation avec ces variables. Ceci permettra d'une part d'avoir un problème bien posé même sur le bord de l'espace des états et d'autre part de donner un sens au problème (2.13) lorsque \mathbf{w} appartient à une phase pure.

Remarquons au passage qu'avec la formulation (2.14) cette proposition devient :

► **PROPOSITION 2.4:**

Soit $(\mathbf{Y}, \mathbf{w}) \mapsto \tilde{\sigma}$ l'entropie hors équilibre (2.10) et soit $(\mathbf{Y}, \mathbf{w}) \in \mathring{\mathcal{T}} \times \mathcal{C}$ un état thermodynamique donné.

❶ Si $(\mathbf{Y}_1^*, \mathbf{w}) \in \mathcal{Q}(\mathbf{w})$ est solution du problème d'optimisation (2.14) alors l'état

$(\mathbf{Y}_1^*, \mathbf{w})$ est dit état de mélange à l'équilibre et on a

$$(T_1, P_1, g_1)(\mathbf{Y}_1^*, \mathbf{w}) = (T_2, P_2, g_2)(\mathbf{Y}_2^*, \mathbf{w}). \quad (2.17)$$

❷ Réciproquement, s'il existe $(\mathbf{Y}_1^*, \mathbf{w}) \in \overset{\circ}{\mathcal{T}} \times \mathcal{C}$ tel que

$$(T_1, P_1, g_1)(\mathbf{Y}_1^*, \mathbf{w}) = (T_2, P_2, g_2)(\mathbf{Y}_2^*, \mathbf{w}),$$

alors $(\mathbf{Y}_1^*, \mathbf{w})$ est solution du problème d'optimisation (2.14). \diamond

Sous les hypothèses de monotonie (2.3) et de concavité (2.4), la maximisation dans la définition (2.13) admet une et une seule solution à l'intérieur de l'espace des états. Pour prouver un résultat d'existence et unicité globale il est nécessaire de travailler en variables volumiques. Le problème d'optimisation (2.14) se réécrit comme suit.

☞ **DÉFINITION 2.8.** La loi d'état de changement de phase est définie par la maximisation de l'entropie hors équilibre (2.12)

$$s^{\text{eq}}(\mathbf{w}) = S^{\text{eq}}(\mathbf{W}) \stackrel{\text{def}}{=} \max_{\mathcal{Q}''(\mathbf{w})} \widehat{\sigma}(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, y_1, y_2) \quad (2.18)$$

ou encore

$$s^{\text{eq}}(\mathbf{w}) = S^{\text{eq}}(\mathbf{W}) \stackrel{\text{def}}{=} \max_{\mathcal{Q}'(\mathbf{W})} \widehat{\sigma}(\mathbf{W}_1, \mathbf{W} - \mathbf{W}_1, y). \quad (2.19)$$

Commençons par prouver ce lemme qui est tout simplement la version «variables volumiques» de la proposition 2.3 à la page 39.

LEMME 2.1:

Soit $(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, y_1, y_2) \mapsto \widehat{\sigma}$ l'entropie hors équilibre (2.11) et soit $\mathbf{W} \stackrel{\text{def}}{=} (V, E) \in \mathbb{R}_+^2$ un état thermodynamique donné.

❶ Si $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \mathcal{Q}''(\mathbf{w})$ est solution du problème d'optimisation (2.18) alors l'état $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*)$ est dit état de mélange à l'équilibre et on a

$$(T_1, P_1, g_1)(\mathbf{W}_1^*, y_1^*) = (T_2, P_2, g_2)(\mathbf{W}_2^*, y_2^*). \quad (2.20)$$

❷ Réciproquement, s'il existe un triplet $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \mathcal{Q}''(\mathbf{w})$ tel que

$$(T_1, P_1, g_1)(\mathbf{W}_1^*, y_1^*) = (T_2, P_2, g_2)(\mathbf{W}_2^*, y_2^*),$$

alors $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*)$ est solution du problème d'optimisation (2.18). \diamond

PREUVE.

❶ Si $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \mathcal{Q}''(\mathbf{w})$ est solution du problème d'optimisation (2.18), alors

il existe un triplet $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ de réels telle que, pour $\alpha = 1, 2$,

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{\sigma}}{\partial V_\alpha} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i \frac{\partial F_i}{\partial V_\alpha}, \\ \frac{\partial \hat{\sigma}}{\partial E_\alpha} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i \frac{\partial F_i}{\partial E_\alpha}, \\ \frac{\partial \hat{\sigma}}{\partial y_\alpha} = \sum_{i=1}^3 \lambda_i \frac{\partial F_i}{\partial y_\alpha}, \end{cases}$$

ayant noté

$$\begin{cases} F_1(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, y_1, y_2) \stackrel{\text{def}}{=} y_1 + y_2 - 1, \\ F_2(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, y_1, y_2) \stackrel{\text{def}}{=} V_1 + V_2 - V, \\ F_3(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, y_1, y_2) \stackrel{\text{def}}{=} E_1 + E_2 - E. \end{cases}$$

Or, on a

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{\sigma}}{\partial V_\alpha} = \frac{\partial S_\alpha}{\partial V_\alpha} = \frac{P_\alpha}{T_\alpha}, \\ \frac{\partial \hat{\sigma}}{\partial E_\alpha} = \frac{\partial S_\alpha}{\partial E_\alpha} = \frac{1}{T_\alpha}, \\ \frac{\partial \hat{\sigma}}{\partial y_\alpha} = \frac{\partial S_\alpha}{\partial y_\alpha} = -\frac{g_\alpha}{T_\alpha}, \\ \sum_{i=1}^3 \lambda_i \frac{\partial F_i}{\partial V_\alpha} = \lambda_2, \\ \sum_{i=1}^3 \lambda_i \frac{\partial F_i}{\partial E_\alpha} = \lambda_3, \\ \sum_{i=1}^3 \lambda_i \frac{\partial F_i}{\partial y_\alpha} = \lambda_1. \end{cases}$$

On obtient donc

$$\left(\frac{1}{T_1}, \frac{P_1}{T_1}, \frac{g_1}{T_1} \right) (\mathbf{W}_1^*, y_1^*) = \left(\frac{1}{T_2}, \frac{P_2}{T_2}, \frac{g_2}{T_2} \right) (\mathbf{W}_2^*, y_2^*).$$

② Soit $\mathbf{W} \in \mathbb{R}_+^2$ un état de mélange donné et considérons un état $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in Q''(\mathbf{w})$ tel que

$$(T_1, P_1, g_1) (\mathbf{W}_1^*, y_1^*) = (T_2, P_2, g_2) (\mathbf{W}_2^*, y_2^*). \quad (2.21)$$

Puisque

$$1 = y_1 + y_2,$$

$$E = E_1 + E_2,$$

$$V = V_1 + V_2,$$

alors

$$dy_2 = -dy_1,$$

$$dE_2 = -dE_1,$$

$$dV_2 = -dV_1.$$

Donc, puisqu'en $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*)$ on a l'égalité (2.21), la différentielle totale de $\hat{\sigma}$

s'écrit

$$\begin{aligned}\widehat{d\hat{\sigma}} &= \sum_{\alpha} \frac{\partial S_{\alpha}}{\partial V_{\alpha}} dV_{\alpha} + \sum_{\alpha} \frac{\partial S_{\alpha}}{\partial E_{\alpha}} dE_{\alpha} + \sum_{\alpha} \frac{\partial S_{\alpha}}{\partial y_{\alpha}} dy_{\alpha} = \\ &= \left(\frac{P_1}{T_1} - \frac{P_2}{T_2} \right) dV_1 + \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) dE_1 - \left(\frac{g_1}{T_1} - \frac{g_2}{T_2} \right) dy_1,\end{aligned}$$

on a alors $d\hat{\sigma}(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) = 0$. L'ensemble $\mathcal{Q}''(\mathbf{W})$ étant un ouvert borné et $\hat{\sigma}$ une fonction concave, alors $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*)$ est un point de maximum et donc solution du problème d'optimisation (2.18). ♦

On peut finalement énoncer la proposition suivante qui étend le lemme 2.1 à la page 42 aux bords du domaine des états.

► **PROPOSITION 2.5:**

Soit $(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, y_1, y_2) \mapsto \hat{\sigma}$ l'entropie hors équilibre (2.11) et soit $\mathbf{W} \stackrel{\text{def}}{=} (V, E) \in \mathbb{R}_+^2$ un état thermodynamique donné. Alors

- ① pour tout $\mathbf{W} \in \mathbb{R}_+^2$, il existe un et un seul état $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \mathcal{Q}''(\mathbf{W})$ solution du problème d'optimisation (2.18); l'état $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*)$ est dit état d'équilibre;
- ② l'état $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \mathcal{Q}''(\mathbf{W})$ est solution du problème d'optimisation (2.18) si et seulement si un des trois systèmes suivants est vérifié :

❶ soit $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \partial \mathcal{Q}''(\mathbf{W})$ avec

$$\text{ou bien} \quad \begin{cases} y_1^* = 1, & y_2^* = 0, \\ S_1(\mathbf{W}_1^*, y_1^*) > S_2(\mathbf{W}_2^*, y_2^*) = 0; \end{cases} \quad (2.22)$$

$$\text{ou bien} \quad \begin{cases} y_1^* = 0, & y_2^* = 1, \\ S_2(\mathbf{W}_2^*, y_2^*) > S_1(\mathbf{W}_1^*, y_1^*) = 0; \end{cases} \quad (2.23)$$

❷ soit $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \mathcal{Q}''(\mathbf{W})$ avec

$$\begin{cases} 0 < y_1^* < 1, & 0 < y_2^* < 1, \\ (T_1, P_1, g_1)(\mathbf{W}_1^*, y_1^*) = (T_2, P_2, g_2)(\mathbf{W}_2^*, y_2^*). \end{cases} \quad (2.24)$$

Lorsque $0 < y_1^*, y_2^* < 1$, l'état \mathbf{W} est dit état de mélange à l'équilibre. ♦

PREUVE (HELLUY (46), HELLUY ET SEGUIN (48)).

- ① L'ensemble des contraintes est un compact et la fonction $\hat{\sigma}$ est continue. Le problème de maximisation (2.18) consiste donc à maximiser une fonctionnelle strictement concave sous contraintes linéaires; ceci nous assure de l'existence et de l'unicité d'un maximum global relatif pour une telle fonctionnelle. En d'autres termes, l'état d'équilibre décrit par $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*)$ constitue l'unique état d'équilibre.
- ② Prouvons les deux implications séparément.

\Rightarrow Soit $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \mathcal{Q}''(\mathbf{W})$ solution du problème d'optimisation (2.18).

Alors,

- si $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \overset{\circ}{\mathcal{Q}}''(\mathbf{W})$ alors $0 < y_1^*, y_2^* < 1$ et, pour le lemme 2.1 à la page 42, on sait que $(T_1, P_1, g_1)(\mathbf{W}_1^*, y_1^*) = (T_2, P_2, g_2)(\mathbf{W}_2^*, y_2^*)$ d'où (2.24);
- si $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \partial \mathcal{Q}''(\mathbf{W})$ alors,
 - soit $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \equiv (\mathbf{W}, \mathbf{0}, 1, 0)$, donc $S_2(\mathbf{W}_2^*, y_2^*) = 0$, $S^{\text{eq}}(\mathbf{W}) \equiv S_1(\mathbf{W}, 1)$ et, par le théorème d'Euler sur les fonctions positivement homogènes de degré 1 (voir remarque 2.3 à la page 37), on a $S_1(\mathbf{W}_1^*, y_1^*) > 0$;
 - soit $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \equiv (\mathbf{0}, \mathbf{W}, 0, 1)$ et on obtient le même résultat qu'au point précédent en échangeant les indices 1 et 2.

\Leftarrow Prouvons maintenant l'implication réciproque en considérant de nouveau séparément trois cas.

- Soit $\mathbf{W} \in \mathbb{R}_+^2$ donné et considérons un état $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \partial \mathcal{Q}''(\mathbf{W})$ tel que

$$\begin{cases} 0 < y_1^* < 1, \\ \left(\frac{1}{T_1}, \frac{P_1}{T_1}, \frac{g_1}{T_1} \right) (\mathbf{W}_1^*, y_1^*) = \left(\frac{1}{T_2}, \frac{P_2}{T_2}, \frac{g_2}{T_2} \right) (\mathbf{W}_2^*, y_2^*). \end{cases}$$

D'après le lemme 2.1 à la page 42 $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*)$ est un point de maximum.

- Soit $\mathbf{W} \in \mathbb{R}_+^2$ donné et considérons un état $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \partial \mathcal{Q}''(\mathbf{W})$ tel que

$$\begin{cases} y_1^* = 1, \\ y_2^* = 0, \\ S_1(\mathbf{W}_1^*, y_1^*) > S_2(\mathbf{W}_2^*, y_2^*), \end{cases}$$

alors $\mathbf{W}_1^* \equiv \mathbf{W}$, $y_1^* \equiv 1$ et $\widehat{\sigma}(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \equiv S_1(\mathbf{W}_1^*, y_1^*)$;

- De la même façon, soit $\mathbf{W} \in \mathbb{R}_+^2$ donné et considérons un état $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \partial \mathcal{Q}''(\mathbf{W})$ tel que

$$\begin{cases} y_1^* = 0, \\ y_2^* = 1, \\ S_1(\mathbf{W}_1^*, y_1^*) < S_2(\mathbf{W}_2^*, y_2^*), \end{cases}$$

alors $\mathbf{W}_2^* \equiv \mathbf{W}$, $y_2^* \equiv 1$ et $\widehat{\sigma}(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \equiv S_2(\mathbf{W}_2^*, y_2^*)$;

En conclusion $(\mathbf{W}_1^*, \mathbf{W}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \mathcal{Q}''(\mathbf{W})$ est solution du problème d'optimisation (2.18). \blacklozenge

Si on veut utiliser le problème d'optimisation (2.19) cette proposition se réécrit tout simplement comme :

PROPOSITION 2.6:

Soit $(\mathbf{W}, \mathbf{W}_1, y) \mapsto \hat{\sigma}$ l'entropie hors équilibre (2.12) et soit $\mathbf{W} \stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{V}, \mathbf{E}) \in \mathbb{R}_+^2$ un état thermodynamique donné. Alors

- ① pour tout $\mathbf{W} \in \mathbb{R}_+^2$, il existe un et un seul état $(\mathbf{W}_1^*, y^*) \in \mathcal{Q}'(\mathbf{W})$ solution du problème d'optimisation (2.19); l'état (\mathbf{W}_1^*, y^*) est dit état d'équilibre;

② l'état $(\mathbf{W}_1^*, y^*) \in \mathcal{Q}'(\mathbf{W})$ est solution du problème d'optimisation (2.19) si et seulement si un des trois systèmes suivants est vérifié :

$$\text{ou bien } \begin{cases} y^* = 1, \\ S_1(\mathbf{W}_1^*, y^*) > S_2(\mathbf{W} - \mathbf{W}_1^*, 1 - y^*) = 0; \end{cases} \quad (2.25)$$

$$\text{ou bien } \begin{cases} y^* = 0, \\ S_2(\mathbf{W} - \mathbf{W}_1^*, 1 - y^*) > S_1(\mathbf{W}_1^*, y^*) = 0; \end{cases} \quad (2.26)$$

$$\text{ou bien } \begin{cases} 0 < y^* < 1, \\ \left(\frac{1}{T_1}, \frac{p_1}{T_1}, \frac{g_1}{T_1} \right) (\mathbf{W}_1^*, y^*) = \left(\frac{1}{T_2}, \frac{p_2}{T_2}, \frac{g_2}{T_2} \right) (\mathbf{W} - \mathbf{W}_1^*, 1 - y^*); \end{cases} \quad (2.27)$$

lorsque $0 < y^* < 1$, l'état \mathbf{W} est dit état de mélange à l'équilibre. \diamond

★ **REMARQUE 2.4.** En passant aux variables volumiques, Helluy [46], Helluy et Seguin [48] ont montré que le problème d'optimisation (2.19) est équivalent à calculer une inf-convolution entre les deux fonctions (convexes)

$$(V_\alpha, E_\alpha, M_\alpha) \mapsto -S_\alpha, \quad \alpha \in \{1, 2\}$$

car

$$\begin{aligned} (\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}} &\stackrel{\text{def}}{=} \max_{\mathbf{Y} \in \mathcal{T}} \sum_{\alpha} y_{\alpha} S_{\alpha} \left(\frac{z_{\alpha}}{y_{\alpha}} \tau, \frac{\psi_{\alpha}}{y_{\alpha}} \varepsilon \right) = \\ &= \max_{\mathbf{Y} \in \mathcal{T}} \left\{ \sum_{\alpha} S_{\alpha}(z_{\alpha} \tau, \psi_{\alpha} \varepsilon, y_{\alpha}) \right\} = \\ &= -((-S_1) \square (-S_2)) = -((-S_1)^* + (-S_2)^*)^*, \end{aligned} \quad (2.28)$$

où le symbole \square désigne l'inf-convolution et $*$ la transformée de Legendre-Fenchel. Ce résultat garantit que $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ est une fonction toujours concave. (Pour plus de détails sur la transformée de Legendre et ses liens avec l'inf-convolution voir l'annexe 2.B à la page 63). \clubsuit

Maintenant on veut reformuler la proposition précédente en fonction des variables molaires. Toutefois, comme on l'a déjà remarqué, la relation

$$(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y_1, y_2) \mapsto (\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, y_1, y_2)$$

n'est pas bijective, ce qui implique qu'en variables molaires on n'a plus d'unicité sur le bord de l'espace des états. Par exemple, considérons un état monophasique \mathbf{w} appartenant à la phase $\alpha = 1$: on a vu que n'importe quel état $(\mathbf{w}, \mathbf{w}_2^*, 1, 0)$ est solution du problème d'optimisation (2.13) car le produit $y_2^* s_2(\mathbf{w}_2^*)$ est toujours nul indépendamment du choix de \mathbf{w}_2^* . Cette ambiguïté ne se présente pas lorsque l'on travaille en variables volumiques car $y_{\alpha} = 0$ si et seulement si $S_{\alpha}(y_{\alpha} \mathbf{w}_{\alpha}, y_{\alpha}) = S_{\alpha}(0, 0, 0) = 0$ (autrement dit $y_{\alpha} = 0$ si et seulement si le produit $y_{\alpha} s_{\alpha}(\mathbf{w}_{\alpha}) = 0$ mais aussi si et seulement si $(V_{\alpha}, E_{\alpha}, y_{\alpha}) = (0, 0, 0)$).

La version «variables molaires» de la proposition 2.5 doit alors être adaptée pour prendre la forme suivante :

➡ **PROPOSITION 2.7 (PRINCIPE D'EXTREMUM):**

Soit $(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y_1, y_2) \mapsto \sigma$ l'entropie hors équilibre définie en (2.9) et soit $\mathbf{w} \in \mathcal{C}$ un état thermodynamique donné. Alors

- ① il existe au moins un état $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \mathcal{Q}(\mathbf{w})$ solution du problème d'optimisation (2.13),
- ② l'état $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y_1^*, y_2^*) \in \mathcal{Q}(\mathbf{w})$ est solution du problème d'optimisation (2.13) si et seulement si un des trois systèmes suivants est vérifié :

$$\text{ou bien } \begin{cases} y_1^* = 1, & y_2^* = 0, \\ s_1(\mathbf{w}) > s_2(\mathbf{w}); \end{cases} \quad (2.29)$$

$$\text{ou bien } \begin{cases} y_1^* = 0, & y_2^* = 1, \\ s_1(\mathbf{w}) < s_2(\mathbf{w}); \end{cases} \quad (2.30)$$

$$\text{ou bien } \begin{cases} 0 < y_1^*, y_2^* < 1, \\ \left(\frac{1}{T_1}, \frac{p_1}{T_1}, \frac{g_1}{T_1} \right) (\mathbf{w}_1^*) = \left(\frac{1}{T_2}, \frac{p_2}{T_2}, \frac{g_2}{T_2} \right) (\mathbf{w}_2^*); \end{cases} \quad (2.31)$$

Un tel $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y_1^*, y_2^*)$ est dit état d'équilibre. Lorsque $0 < y_1^*, y_2^* < 1$, l'état \mathbf{w} est dit état à saturation ou état de mélange à l'équilibre.

- ③ si $\mathbf{w} \in \mathcal{C}$ est un état de mélange à l'équilibre alors la solution du problème d'optimisation (2.13) est unique, sinon il existe une infinité de solutions. \diamond

Soulignons que les inégalités (2.29) et (2.30) en réalité ne proviennent pas de la généralisation de la proposition 2.5 mais sont une conséquence de la proposition 2.9 à la page 50 qu'on démontrera par la suite (on remarque aussi que dans (2.29) et (2.30) les entropies s_α sont évaluées en \mathbf{w} et non en \mathbf{w}_α).

Une méthode pour calculer numériquement l'entropie s^{eq} dans le cas particulier de deux gaz parfaits sera illustrée au chapitre 5; un calcul approché pour le cas de deux *stiffened gas* sera présenté au chapitre 6. Pour des lois d'état plus générales, voire tabulées, il est vrai qu'il existe des algorithmes performants pour calculer l'inf-convolution et/ou la transformée de Legendre-Fenchel (voir par exemple Corrias [29] et Lucet [76; 77]), cependant la particularité de notre problème permet de développer une stratégie plus simple et moins coûteuse qu'on détaillera au chapitre 7.

2.2.3. Conditions de compatibilité

Au début de ce chapitre, suivant la thermodynamique classique, on s'est placé dans le cadre où une entropie, de matrice hessienne définie négative (et donc strictement concave), est donnée pour chaque phase pure. Cette hypothèse a un caractère purement monophasique. Cependant une transition de phase n'apparaît pas spontanément entre deux fluides quelconques, mais entre un liquide et sa vapeur. On veut donc considérer ici des lois d'état particulières pour lesquelles un équilibre liquide-vapeur peut exister entre ses phases.

Entropie sans changement de phase

$$(2.9) \quad \mathcal{Q}(\mathbf{w}) \stackrel{\text{def}}{=} \{(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y_1, y_2) \mid 1 = y_1 + y_2, \mathbf{w} = y_1 \mathbf{w}_1 + y_2 \mathbf{w}_2\}$$

$$\sigma(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y_1, y_2) \stackrel{\text{def}}{=} y_1 s_1(\mathbf{w}_1) + y_2 s_2(\mathbf{w}_2)$$

$$(2.10) \quad \mathcal{T} \stackrel{\text{def}}{=} \{\mathbf{Y} \mid 0 \leq y \leq 1, 0 \leq z \leq 1, 0 \leq \psi \leq 1\}$$

$$\tilde{\sigma}(y, z, \psi, \mathbf{w}) \stackrel{\text{def}}{=} y s_1\left(\frac{z}{y} \tau, \frac{\psi}{y} \varepsilon\right) + (1 - y) s_2\left(\frac{1-z}{1-y} \tau, \frac{1-\psi}{1-y} \varepsilon\right)$$

$$(2.11) \quad \mathcal{Q}''(\mathbf{W}) \stackrel{\text{def}}{=} \{(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, y_1, y_2) \in \mathbb{R}_+^2 \times \mathbb{R}_+^2 \times [0, 1] \times [0, 1] \mid$$

$$\mathbf{W}_1 + \mathbf{W}_2 = \mathbf{W}, y_1 + y_2 = 1\}$$

$$\hat{\sigma}(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, y_1, y_2) \stackrel{\text{def}}{=} S_1(\mathbf{W}_1, y_1) + S_2(\mathbf{W}_2, y_2)$$

$$(2.12) \quad \mathcal{Q}'(\mathbf{W}) \stackrel{\text{def}}{=} \{(\mathbf{W}_1, y) \in \mathbb{R}_+^2 \times [0, 1] \mid 0 \leq \mathbf{W}_1 \leq \mathbf{W}, 0 \leq y \leq 1\}$$

$$\hat{\sigma}(\mathbf{W}, \mathbf{W}_1, y) \stackrel{\text{def}}{=} S_1(\mathbf{W}_1, y) + S_2(\mathbf{W} - \mathbf{W}_1, 1 - y)$$



Entropie avec changement de phase

$$(2.13) \quad s^{\text{eq}}(\mathbf{w}) \stackrel{\text{def}}{=} \max_{\mathcal{Q}(\mathbf{w})} \sigma(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y_1, y_2)$$

$$(2.14) \quad s^{\text{eq}}(\mathbf{w}) \stackrel{\text{def}}{=} \max_{\mathcal{T}} \tilde{\sigma}(y, z, \psi, \mathbf{w})$$

$$(2.18) \quad s^{\text{eq}}(\mathbf{w}) \stackrel{\text{def}}{=} S^{\text{eq}}(\mathbf{W}) = \max_{\mathcal{Q}''(\mathbf{W})} \hat{\sigma}(\mathbf{W}_1, \mathbf{W}_2, y_1, y_2)$$

$$(2.19) \quad s^{\text{eq}}(\mathbf{w}) \stackrel{\text{def}}{=} S^{\text{eq}}(\mathbf{W}) = \max_{\mathcal{Q}'(\mathbf{W})} \hat{\sigma}(\mathbf{W}, \mathbf{W}_1, y)$$

FIG. 2.5.: Récapitulatif

D'autre part on sait que les changements de phase liquide-vapeur sont des changements du premier ordre ce qui entraîne la différence des volumes et des énergies internes molaires associés à un liquide et à sa vapeur à travers la courbe de coexistence (cf. la définition 2.1 à la page 33). Ils impliquent également l'existence d'un triple équilibre isobare isotherme équipotentiel pour les états en changement de phase (et donc à l'intérieur du dôme de saturation).

Pour distinguer les lois d'état utilisables dans chaque phase on postule l'hypothèse mathématique suivante qui correspond à l'hypothèse physique 2.3 à la page 35 :

☞ **HYPOTHÈSE 2.5.** *Pour décrire les propriétés thermodynamiques d'un état \mathbf{w} dans lequel coexistent les deux phases liquide et vapeur d'un même fluide (c'est-à-dire pour lequel il existe $(\mathbf{w}_\alpha^*, y^*)$ tel que $\mathbf{w} = y^* \mathbf{w}_1^* + (1 - y^*) \mathbf{w}_2^*$ avec $0 < y^* < 1$), tout couple de lois d'état $\mathbf{w}_\alpha \mapsto s_\alpha$ présente, à saturation (c'est-à-dire pour $\mathbf{w}_\alpha = \mathbf{w}_\alpha^*$), des volumes et des énergies internes molaires différentes. En particulier, $\tau_{\text{liq}}^* < \tau_{\text{vap}}^*$ et $\varepsilon_{\text{liq}}^* < \varepsilon_{\text{vap}}^*$ (ce qui implique $s_{\text{liq}}^* < s_{\text{vap}}^*$ où $s_\alpha^* \stackrel{\text{def}}{=} s_\alpha(\mathbf{w}_\alpha^*)$).*

Avec la notation adoptée dans ce chapitre cette hypothèse s'écrit sous la forme

$$0 < y^* < 1 \Rightarrow \begin{cases} \text{ou bien } \{\tau_1^* < \tau_2^*, \varepsilon_1^* < \varepsilon_2^*, s_1(\mathbf{w}_1^*) < s_2(\mathbf{w}_2^*)\}, \\ \text{ou bien } \{\tau_1^* > \tau_2^*, \varepsilon_1^* > \varepsilon_2^*, s_1(\mathbf{w}_1^*) > s_2(\mathbf{w}_2^*)\}. \end{cases}$$

2.2.4. Loi d'état avec changement de phase : enveloppe concave

Dans ce paragraphe on verra comment le procédé d'optimisation (2.13), qui définit la loi d'état à saturation, peut être ramené au calcul de l'enveloppe concave de la fonction

$$\mathbf{w} \mapsto \max\{s_1(\mathbf{w}), s_2(\mathbf{w})\}.$$

Cette approche donne une autre définition (équivalente à la précédente) des «états saturés» d'un fluide (voir Callen [20]) et elle a été déjà utilisée par exemple par Caro [21], Caro *et al.* [22; 23; 24] et Jaouen [58] pour des simulations numériques.

En s'inspirant des constructions de ces auteurs, donnons ci-dessous un résultat géométrique qui caractérise la solution de (2.13).

☞ **PROPOSITION 2.8 (PLAN BITANGENT):**

Soient S_α les surfaces d'équation $\mathbf{w} \mapsto s_\alpha$ dans l'espace (\mathbf{w}, s) et soit $\mathbf{w} \in \mathcal{C}$ un état thermodynamique fixé.

Si le triplet $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y^*) \in \mathcal{Q}(\mathbf{w})$ maximise la fonction $(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y) \mapsto \sigma$ et si y^* appartient à l'intervalle ouvert $]0, 1[$, alors il existe un unique plan, dit «plan bitangent», qui est tangent à la surface S_1 au point (\mathbf{w}_1^*, s_1^*) et à la surface S_2 au point (\mathbf{w}_2^*, s_2^*) avec $s_\alpha^* \stackrel{\text{def}}{=} s_\alpha(\mathbf{w}_\alpha^*)$.

Pour ces $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*)$, tout état $\mathbf{w} \stackrel{\text{def}}{=} y \mathbf{w}_1^* + (1 - y) \mathbf{w}_2^*$ avec $y \in]0, 1[$ est dit «état saturé» (ou «de mélange à l'équilibre») et appartient à S , graphe de s^{eq} . \diamond

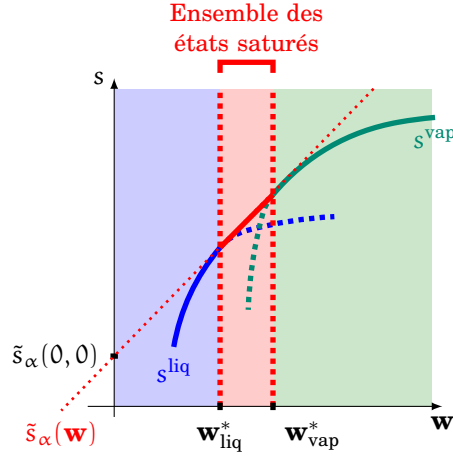


FIG. 2.6.: Plan bitangent

PREUVE.

On doit prouver que le plan tangent à la surface S_1 au point (\mathbf{w}_1^*, s_1^*) et le plan tangent à la surface S_2 au point (\mathbf{w}_2^*, s_2^*) coïncident, c'est-à-dire qu'ils ont les mêmes pentes et la même ordonnée à l'origine (voir la figure 2.6).

Le plan tangent à la surface S_α en $(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha)$ a pour équation

$$\tilde{s}_\alpha(\tau, \varepsilon) = \frac{P_\alpha}{T_\alpha} \tau + \frac{1}{T_\alpha} \varepsilon + \frac{g_\alpha}{T_\alpha}.$$

Les deux plans \tilde{s}_1 et \tilde{s}_2 sont donc parallèles si et seulement si on a égalité des pressions et des températures :

$$\tilde{s}_1 \parallel \tilde{s}_2 \Leftrightarrow \begin{cases} P_1/T_1 = P_2/T_2 \\ 1/T_1 = 1/T_2 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} P_1 = P_2, \\ T_1 = T_2. \end{cases}$$

Pour qu'ils coïncident il ne reste qu'à imposer le fait qu'ils passent par un même point, par exemple par l'origine, d'où

$$\tilde{s}_1(0, 0) = \tilde{s}_2(0, 0) \Leftrightarrow \frac{g_1}{T_1} = \frac{g_2}{T_2},$$

ce qui conclut la preuve. \blacklozenge

Rappelons maintenant un résultat classique en analyse convexe (voir par exemple Hiriart-Urruty et Lemaréchal [54] ou encore Callen [20] pour l'application en thermodynamique) qui relie le problème d'optimisation (2.13) et la construction du plan bitangent de la proposition 2.8.

➡ **PROPOSITION 2.9 (ENVELOPPE CONCAVE):**

Soit S le graphe de l'entropie d'équilibre s^{eq} dans l'espace tridimensionnel (\mathbf{w}, s) . Alors

- ❶ la surface S délimite l'enveloppe concave de l'ensemble

$$\{(\mathbf{w}, s) \mid s \leq \max[s_1(\mathbf{w}), s_2(\mathbf{w})]\};$$

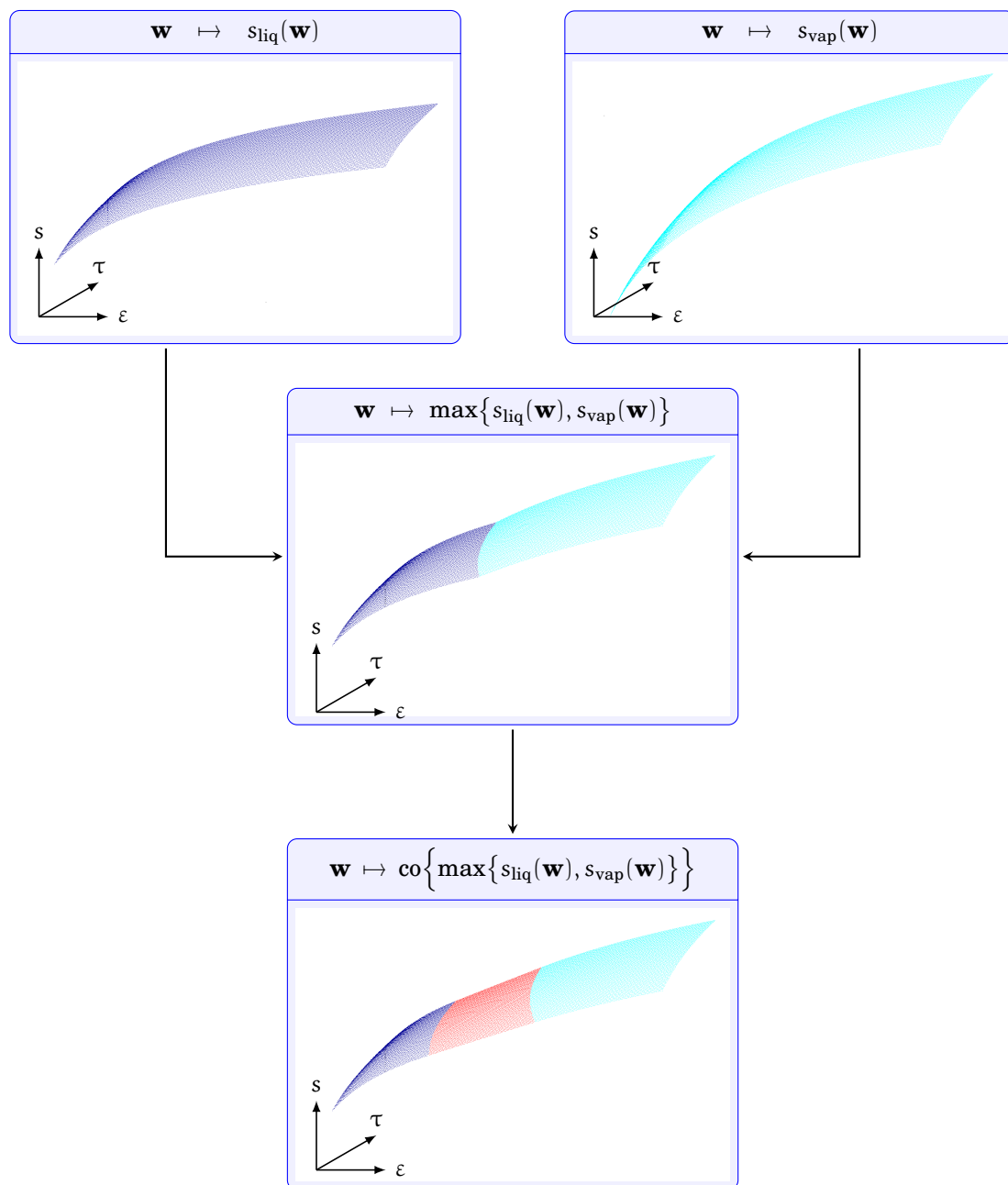


FIG. 2.7.: Construction géométrique de l'entropie à l'équilibre

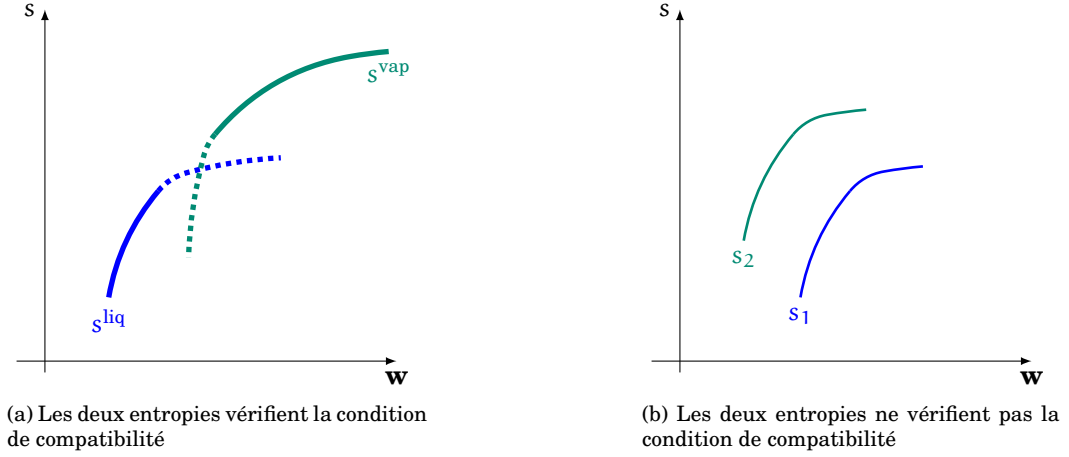


FIG. 2.8.: Condition de compatibilité 2.5 à la page 49

- ❷ pour tout état saturé $\mathbf{w} \in \mathcal{C}$, la surface S contient un segment de droite qui passe par le point $(\mathbf{w}, s^{\text{eq}}(\mathbf{w}))$. Le long de ce segment la pression P , la température T et l'enthalpie libre g sont constantes. \diamond

Par conséquent, résoudre le problème d'optimisation (2.13) équivaut soit à trouver $y^* \in \{0, 1\}$ soit à chercher les points \mathbf{w}_α^* à travers lesquels passe le plan bitangent aux surfaces S_1 et S_2 .

D'une manière générale cette proposition traduit le fait qu'une transition de phase a lieu lorsque la stabilité thermodynamique n'est plus vérifiée. Elle est donc liée à la perte de concavité de la fonction $\mathbf{w} \mapsto \max\{s_1(\mathbf{w}), s_2(\mathbf{w})\}$ comme on peut voir à la figure 2.7 à la page précédente. Remarquons que la condition de compatibilité énoncée plus haut (cf. hypothèse 2.5 à la page 49) permet d'exclure les cas de la figure 2.8b où les deux surfaces sont emboîtées et donc d'intersection vide.

En toute généralité l'entropie à saturation $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ n'est pas de classe \mathcal{C}^2 mais seulement de classe \mathcal{C}^1 (cf. Benoist et Hiriart-Urruty [13]). Supposons dans la suite qu'elle soit de classe \mathcal{C}^2 par morceaux au sens où la zone de mélange (définie par le système (2.24) à page 44) est une variété de classe \mathcal{C}^2 avec un bord qui est une boucle simple fermée de classe \mathcal{C}^1 .

Nous avons alors démontré le théorème suivant.

☆ **THÉORÈME 2.1 (EXISTENCE ET UNICITÉ):**

Soient S_α les graphes des entropies monophasiques $\mathbf{w}_\alpha \mapsto s_\alpha$ dans l'espace tridimensionnel (\mathbf{w}, s) et soit $\mathbf{w} \in \mathcal{C}$ un état à saturation (défini à la proposition 2.7 à la page 47). Alors il existe un unique couple de points

$$\mathbf{M}_1^* \stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{w}_1^*, s_1^* \stackrel{\text{def}}{=} s_1(\mathbf{w}_1^*)) \in S_1 \quad \text{et} \quad \mathbf{M}_2^* \stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{w}_2^*, s_2^* \stackrel{\text{def}}{=} s_2(\mathbf{w}_2^*)) \in S_2$$

tel que le point $\mathbf{M} \stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{w}, s^{\text{eq}}(\mathbf{w}))$ appartient au segment

$$\tau_{12} \stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{M}_1^*, \mathbf{M}_2^*) = \{y\mathbf{M}_1^* + (1-y)\mathbf{M}_2^* \mid y \in [0, 1]\}.$$

◇

PREUVE.

- ☛ L'existence du segment τ_{12} découle de la proposition 2.9 avec les conditions de compatibilité 2.5 à la page 49.
- ☛ Prouvons l'unicité : les deux entropies s_α sont strictement concaves et croissantes en τ et ε donc il existe deux bijections entre le couple $(P^{\text{eq}}, T^{\text{eq}})$ associé à l'état \mathbf{w} et deux états purs \mathbf{w}_α^* :

$$\mathbf{w}_1^* \quad \leftrightarrow \quad (P^{\text{eq}}, T^{\text{eq}}) \quad \leftrightarrow \quad \mathbf{w}_2^*.$$

Supposons qu'il existe un autre segment $\tilde{\tau}_{12} \stackrel{\text{def}}{=} ((\tilde{\mathbf{w}}_1^*, \tilde{s}_1^*), (\tilde{\mathbf{w}}_2^*, \tilde{s}_2^*))$ qui contient le point M , autrement dit $M \in \tau_{12} \cap \tilde{\tau}_{12}$ (cf. figure 2.9).

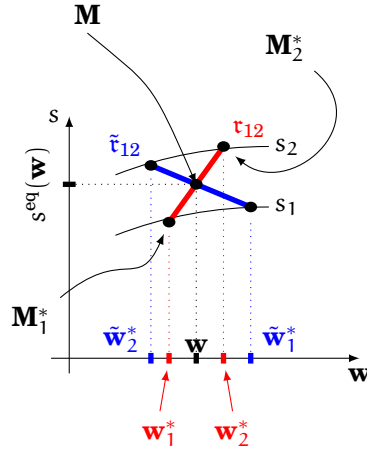


FIG. 2.9.: Unicité du segment τ_{12}

Puisque la pression et la température $(P^{\text{eq}}, T^{\text{eq}})$ sont constantes le long des deux segments τ_{12} et $\tilde{\tau}_{12}$, alors $\mathbf{w}_\alpha^* = \tilde{\mathbf{w}}_\alpha^*$ et par conséquent les deux segments coïncident. ♦

Ce théorème affirme donc que, pour tout état \mathbf{w} dans la zone de coexistence des deux phases, la surface d'entropie S a une courbure nulle dans une (unique !) direction. Par ailleurs, comme le potentiel g est constant sur le segment τ_{12} , la surface S est réglée ; puisque le plan tangent à cette surface est le même pour tous les états \mathbf{w} de τ_{12} , la surface S est développable (c'est à dire que le déterminant de la matrice hessienne est nul).

Pour tout état $\mathbf{w} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, \varepsilon)$ donné, trois cas sont alors possibles :

- ☛ si $\tau < \tau_{\text{liq}}^*$ le volume du fluide est inférieur à celui de saturation du liquide ; le fluide est alors un liquide pur ;

- ☞ si $\tau > \tau_{\text{vap}}^*$ le volume du fluide est supérieur à celui de saturation du gaz ; le fluide est alors un gaz pur ;
- ☞ si $\tau_{\text{liq}}^* < \tau < \tau_{\text{vap}}^*$ le volume du fluide se situe entre les deux volumes de saturation ; on calcule alors la fraction de volume par le biais des équations propres à la zone de saturation : $\mathbf{w} = y\mathbf{w}_{\text{liq}}^* + (1 - y)\mathbf{w}_{\text{vap}}^*$.

2.3. Conclusion

Dans ce chapitre on a construit la loi d'état de changement de phase $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$ en supposant l'équilibre thermodynamique d'un fluide entre sa phase liquide et sa phase vapeur. La construction est basée sur la solution d'un problème d'optimisation et elle est équivalente à la «concavification» d'une entropie de mélange. La démarche proposée est valable pour une large classe de fluides car, outre une hypothèse de régularité, les seules hypothèses nécessaires sont celles qui qualifient classiquement la stabilité d'un corps pur homogène : chaque phase doit être munie d'une entropie molaire dont la matrice hessienne est définie négative relativement aux variables de volume et d'énergie interne molaires. En étudiant le problème d'optimisation ainsi que la construction géométrique, on peut enfin conclure avec la définition suivante.

☞ **DÉFINITION 2.9 (LOI DE CHANGEMENT DE PHASE).** *Pour tout couple $(\tau, \varepsilon) \in \mathcal{C}$,*

- ① *si $(\tau_{\text{liq}}^*, \varepsilon_{\text{liq}}^*, \tau_{\text{vap}}^*, \varepsilon_{\text{vap}}^*, y^*)$ est solution du système*

$$\begin{cases} P_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = P_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) \end{cases} \quad (2.32a)$$

$$\begin{cases} T_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = T_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) \end{cases} \quad (2.32b)$$

$$\begin{cases} g_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = g_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) \end{cases} \quad (2.32c)$$

$$\begin{cases} \varepsilon = y\varepsilon_{\text{liq}} + (1 - y)\varepsilon_{\text{vap}} \end{cases} \quad (2.32d)$$

$$\begin{cases} \tau = y\tau_{\text{liq}} + (1 - y)\tau_{\text{vap}} \end{cases} \quad (2.32e)$$

et $y^ \in]0, 1[$ alors on pose*

$$s^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = y^* s_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}^*, \varepsilon_{\text{liq}}^*) + (1 - y^*) s_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}^*, \varepsilon_{\text{vap}}^*);$$

- ② *si le système (2.32) n'a pas de solution ou bien s'il admet des solutions mais y^* n'est pas dans l'ouvert $]0, 1[$ alors l'état (τ, ε) est un état monophasique et on choisit à quelle phase il appartient selon la règle suivante :*

- ① *si $s_{\text{liq}}(\tau, \varepsilon) > s_{\text{vap}}(\tau, \varepsilon)$, on pose $y^* = 1$, $\tau_{\text{liq}}^* = \tau$, $\varepsilon_{\text{liq}}^* = \varepsilon$ et*

$$s^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = s_{\text{liq}}(\tau, \varepsilon),$$

(les valeurs de τ_{vap}^ et $\varepsilon_{\text{vap}}^*$ sont quelconques);*

② si $s_{\text{liq}}(\tau, \varepsilon) < s_{\text{vap}}(\tau, \varepsilon)$, on pose $y^* = 0$, $\tau_{\text{vap}}^* = \tau$, $\varepsilon_{\text{vap}}^* = \varepsilon$ et

$$s^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = s_{\text{vap}}(\tau, \varepsilon),$$

(les valeurs de τ_{liq}^* et $\varepsilon_{\text{liq}}^*$ sont quelconques).

Soulignons que le système (2.32) est équivalent à un système de deux équations en deux inconnues. En effet on observe d'abord que, à partir des relations (2.32a)-(2.32b), on peut écrire les volumes et les énergies internes en fonction d'une même pression P et d'une même température T . En utilisant l'équation (2.32e), on écrit la fraction volumique y en fonction de P et T

$$y(P, T) = \frac{\tau - \tau_{\text{vap}}(P, T)}{\tau_{\text{liq}}(P, T) - \tau_{\text{vap}}(P, T)}.$$

On remplace cette expression dans l'équation (2.32d) et donc le système (2.32) se réécrit comme un système de deux équations en les deux inconnues pression et température :

$$\begin{cases} g_{\text{liq}}(P, T) = g_{\text{vap}}(P, T), \\ \frac{\tau - \tau_{\text{vap}}(P, T)}{\tau_{\text{liq}}(P, T) - \tau_{\text{vap}}(P, T)} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{vap}}(P, T)}{\varepsilon_{\text{liq}}(P, T) - \varepsilon_{\text{vap}}(P, T)}. \end{cases}$$

L'équation $g_{\text{liq}}(P, T) = g_{\text{vap}}(P, T)$ est celle qui classiquement définit la courbe de co-existence, c'est-à-dire la fonction $T \mapsto P^{\text{sat}}(T)$ (ou de son inverse $P \mapsto T^{\text{sat}}(P)$). On peut donc introduire la définition suivante :

☞ **DÉFINITION 2.10 (ÉQUATION DU CHANGEMENT DE PHASE).** Pour tout couple $(\tau, \varepsilon) \in \mathcal{C}$, nous appelons «équation du changement de phase» l'équation

$$\frac{\tau - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}$$

avec $\star_{\alpha}^{\text{sat}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \star_{\alpha}(T, P^{\text{sat}}(T))$, ou réciproquement l'équation

$$\frac{\tau - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)}{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)}$$

avec $\star_{\alpha}^{\text{sat}}(P) \stackrel{\text{def}}{=} \star_{\alpha}(P, T^{\text{sat}}(P))$.

Métastabilité et modèle de mélange à l'équilibre

En perspective, il serait intéressant de voir s'il est possible de prendre en compte la métastabilité en modifiant notre modèle de changement de phase.

D'après notre construction, aux conditions $(P, T)^{\text{eq}}$ données, les uniques états du fluide que l'on prend en considération sont les états dits «stables». Cependant physiquement aux mêmes conditions de température et de pression, le même fluide peut éventuellement exister sous plusieurs formes classifiées par ordre croissant d'enthalpie libre g : la première est stable (celle qu'on considère avec notre construction) et les

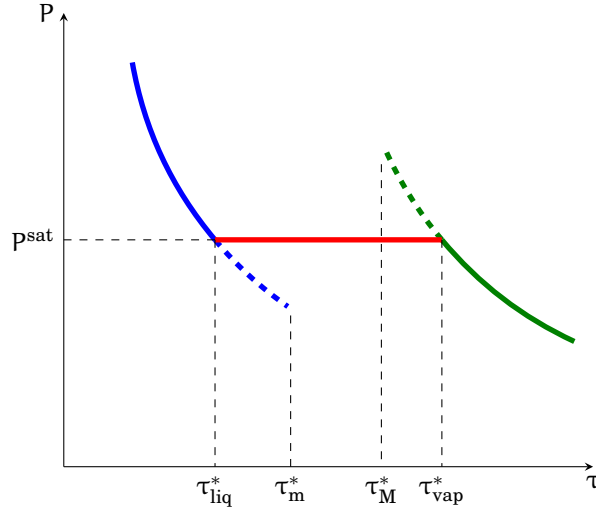


FIG. 2.10.: Metastabilité

autres métastables. Le nom «métastable» vient du fait qu'une petite perturbation de ces états les fait basculer violemment vers un équilibre stable dans une autre phase (parfois on parle de retard au changement de phase).

Les états métastables qu'on peut rencontrer lors d'un changement de phase liquide-vapeur sont ceux d'un liquide surchauffé (un état qui «devrait» être de mélange à l'équilibre mais qui en réalité est encore du liquide) ou d'un gaz sous-refroidi (un état qui «devrait» être de mélange à l'équilibre mais qui en réalité est encore de la vapeur). Pour comprendre comment ces états pourraient s'inscrire dans notre modèle de changement de phase, commençons par considérer la loi d'état (incomplète) $(\tau, T) \mapsto P^{eq}$ le long d'une isotherme

$$P^{eq} = \begin{cases} P_{liq}, & \text{si } \tau < \tau_{liq}^*, \\ p_{sat}, & \text{si } \tau_{liq}^* < \tau < \tau_{vap}^*, \\ P_{vap}, & \text{si } \tau_{vap}^* < \tau. \end{cases}$$

Si on veut prendre en compte les états métastables, on introduit une nouvelle loi d'état, qu'on note $P = P^{met}$, définie comme

$$P^{met} = \begin{cases} P_{liq}, & \text{si } \tau < \tau_{liq}^*, \\ [p_{sat} \text{ ou } P_{liq}], & \text{si } \tau_{liq}^* < \tau < \tau_m^*, \\ p_{sat}, & \text{si } \tau_m^* < \tau < \tau_M^*, \\ [p_{sat} \text{ ou } P_{vap}], & \text{si } \tau_M^* < \tau < \tau_{vap}^*, \\ P_{vap}, & \text{si } \tau_{vap}^* < \tau, \end{cases}$$

avec τ_m^* et τ_M^* les limites de metastabilité respectivement du liquide et de la vapeur (voir figure 2.10).

Les difficultés principales d'une telle définition sont tout d'abord le fait que la pres-

sion $P = P^{\text{met}}$ est discontinue mais surtout le fait que le choix entre P^{sat} ou P_{liq} (resp. P^{sat} ou P_{vap}) devra dépendre du parcours thermodynamique ainsi que de l'écoulement.



Annexe 2.A Lien avec le modèle de Van des Waals

Le modèle de Van der Waals est sans doute le modèle de transition de phase liquide-vapeur le plus connu (voir par exemple Greiner *et al.* [44, p. 82]). Dans cette brève annexe on veut montrer que la construction de Maxwell pour une loi de Van der Waals est, en une certains sens, un cas particulier de la loi de changement de phase obtenue par notre approche à deux lois d'état monophasiques.

2.A.1 Équation d'état

La loi de van der Waals peut être vue comme une modification de la loi des gaz parfaits, qui prend en compte la taille (non nulle) des molécules, à travers un volume molaire minimum appelé covolume, ainsi que certaines forces intermoléculaires.

L'équation d'état $(\tau, s) \mapsto \varepsilon$ s'écrit

$$(\tau, s) \mapsto \varepsilon \stackrel{\text{def}}{=} (\tau - b)^{-\frac{r}{c_v}} \exp\left(\frac{s}{c_v}\right) - \frac{a}{\tau}, \quad 0 < b < \tau < +\infty,$$

où $r > 0$ est la constante des gaz parfaits et les coefficients a et b sont des constantes dépendantes du fluide considéré : a , dit «pression de cohésion», permet de prendre en compte l'attraction mutuelle des atomes du gaz ; b , dit «covolume», représente le volume propre des atomes d'une mole de gaz et s'interprète comme un volume exclu (il n'est pas possible de rendre le volume du gaz inférieur à b). Il existe des tables donnant a et b pour des fluides divers même si, évidemment, ils ne suivent pas parfaitement cette loi.

Par définition la température T et la pression P sont déduites des dérivées premières de l'énergie ε selon les relations

$$\begin{aligned} T(\tau, s) &\stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} \right|_{\tau} = \frac{1}{c_v} (\tau - b)^{-\frac{r}{c_v}} \exp\left(\frac{s}{c_v}\right) = \frac{\varepsilon(\tau, s) + \frac{a}{\tau}}{c_v}; \\ P(\tau, s) &\stackrel{\text{def}}{=} - \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} \right|_s = \frac{r}{c_v} (\tau - b)^{-\frac{r}{c_v}-1} \exp\left(\frac{s}{c_v}\right) - \frac{a}{\tau^2} = \frac{r}{c_v} \frac{\varepsilon(\tau, s) + \frac{a}{\tau}}{\tau - b} - \frac{a}{\tau^2} = \frac{rT(\tau, s)}{c_v(\tau - b)} - \frac{a}{\tau^2}. \end{aligned}$$

L'équation d'état (incomplète), en fonction du volume molaire et de la température, s'écrit donc

$$(\tau, T) \mapsto P \stackrel{\text{def}}{=} \frac{rT}{\tau - b} - \frac{a}{\tau^2}, \quad 0 < b < \tau < +\infty.$$

Considérons dans le plan (τ, P) les courbes isothermes. Elles ressemblent à celle de la figure 2.11 à la page suivante. On a $\lim_{\tau \rightarrow b^+} P(\tau) = +\infty$ et $\lim_{\tau \rightarrow +\infty} P(\tau) = 0$ et il est

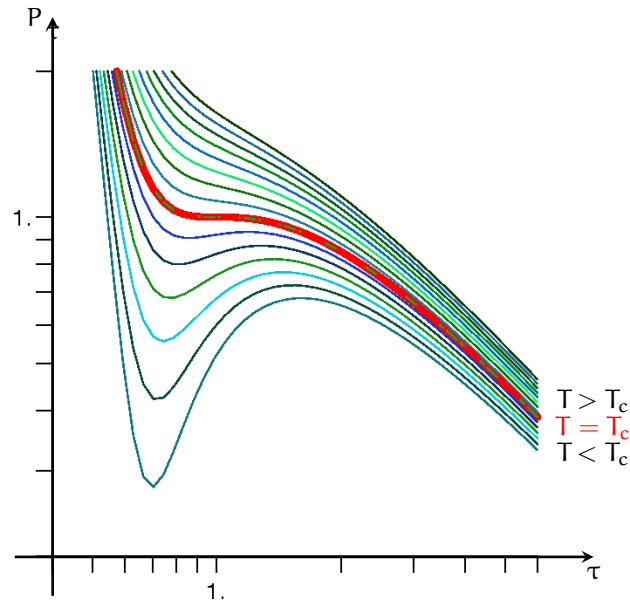


FIG. 2.11.: Isothermes du modèle de Van der Waals pour l'équation réduite $\tau_R \mapsto P_R|_{T_R}$ dans le plan (τ_R, P_R) en échelle logarithmique. L'isotherme plus épaisse correspond à l'isotherme critique

simple de voir qu'il y a une température critique T_c en dessous de laquelle il existe deux valeurs ℓ et v du volume molaire tels que, à température T fixée,

- ☞ $P' < 0$ dans $]0, \ell[$ et dans $]v, +\infty[$,
- ☞ $P'(\ell) = P'(v) = 0$,
- ☞ $P' > 0$ dans $]\ell, v[$.

On observe aussi que, à température et pression fixées, la loi d'état est une équation de troisième degré en τ telle que

- ☞ si $T = T_c$ il y a 3 racines réelles coïncidentes (on parle de transition du second ordre),
- ☞ si $T > T_c$ il y a 1 seule racine réelle (il n'y a pas de transition de phase),
- ☞ si $T < T_c$ il y a 3 racines réelles (transition de phase du premier ordre de type liquide-vapeur).

On remarque que la notion de point critique est très importante : la température critique T_c est la limite inférieure des températures pour lesquelles la pression est une fonction décroissante du volume. À cette température, le graphe de la pression en fonction du volume admet un unique point d'inflexion horizontal.

Isotherme critique et forme réduite

Le point critique C joue un rôle important pour l'équation de Van der Waals. Intéressons nous d'abord donc à l'isotherme critique, c'est-à-dire à l'isotherme qui passe par le point critique. Il est clair que cette isotherme a, au point C , un point d'inflexion où la pente est nulle (le point de contact avec le dôme de saturation). En effet la position du point critique se trouve en imposant l'annulation des dérivées premières et secondes

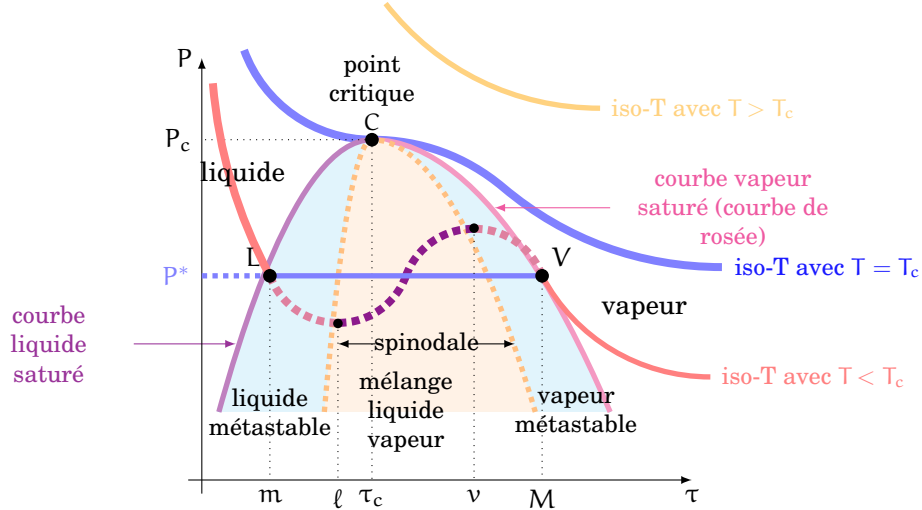


FIG. 2.12.: Modèle de Van der Waals. La courbe bleu est la courbe de saturation, dans la zone bleutée on est en présence des deux phases. Puisque le changement de phase se fait à pression et à température constantes, l'isotherme physique est horizontale dans la zone de mélange : elle coïncide avec l'isobare. Au point critique C l'isotherme T_c a tangente horizontale

de la pression par rapport au volume : $\frac{\partial P}{\partial \tau}\bigg|_T = 0$ et $\frac{\partial^2 P}{\partial \tau^2}\bigg|_T = 0$. Cela donne un seul état, dit «point critique», $P_c = \frac{a}{27b^2}$, $T_c = \frac{8a}{27br}$ et $\tau_c = 3b$. Les grandeurs réduites utilisent le point critique de chaque gaz comme point de comparaison, en divisant les grandeurs d'état par leur expression critique. Elles sont adimensionnelles et définies comme suit :

$$P_R \stackrel{\text{def}}{=} \frac{P}{P_c}, \quad T_R \stackrel{\text{def}}{=} \frac{T}{T_c}, \quad \tau_R \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\tau}{\tau_c}.$$

Grâce à ces quantités on peut formuler l'équation de Van der Waals réduite (qui est la même pour tout les fluides) :

$$(\tau_R, T_R) \mapsto P_R \stackrel{\text{def}}{=} \frac{8T_R}{3\tau_R - 1} - \frac{3}{\tau_R^2}, \quad \frac{1}{3} < \tau_R < +\infty.$$

Zone spinodale

Considérons maintenant les isothermes aux températures inférieures à celle critique.

Dans la region du dôme de saturation colorée en **bleu** à la figure 2.13a à la page suivante, les zones $\{m < \tau < \ell\}$ et $\{v < \tau < M\}$ sont appelés *zones métastables*. Les états de cette zone sont très instables : dès qu'une particule entre dans cette zone, elle est immédiatement transformée en liquide ou en vapeur.

Toujours à l'intérieur du dôme de saturation, la partie colorée en **orange** est dite *zone spinodale* ; dans cette zone les isothermes ne sont plus monotones. Le comportement de cette partie d'isotherme (voir **ligne violette** dans la figure 2.13a à la page suivante) n'est pas physique puisqu'il correspond à $\frac{\partial P}{\partial \tau}\bigg|_T > 0$, ce qui signifie une augmentation

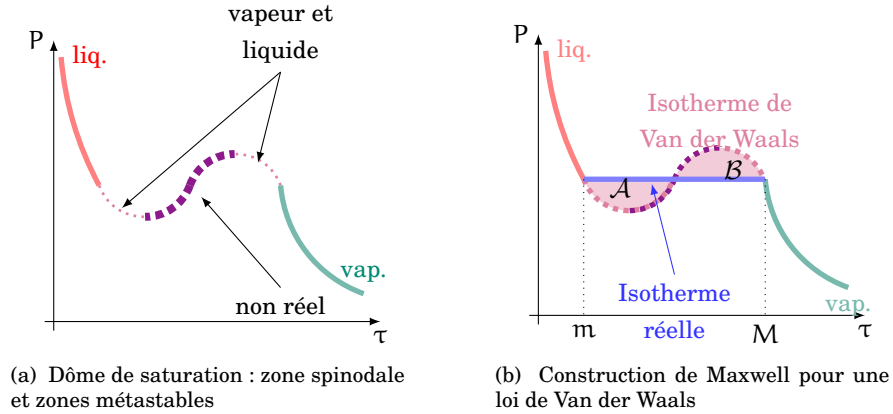


FIG. 2.13.: Loi d'état de Van der Waals : dôme de saturation et construction de Maxwell

de pression sous augmentation de volume : on peut donc dire que l'équation de Van der Waals décrit de façon satisfaisante les propriétés à la transition liquide-vapeur *seulement au dessus du point critique* ou en dessous mais en dehors du dôme de saturation. À l'intérieur du dôme de saturation le modèle doit être modifié pour tenir compte des phénomène de changement d'état.

Isothermes physiques

Pour rendre compte des phénomènes de changement de phase, les isothermes sub-critiques sont modifiées par l'introduction d'un palier de saturation à une pression dépendant seulement de la température. La valeur de ce palier est obtenue en imposant l'égalité des potentiels de Gibbs $g^{\text{liq}} = g^{\text{vap}}$ le long du segment isotherme-isobare. On voit donc que cette construction coïncide avec la construction de notre loi de changement de phase.

Dans le cas d'une loi d'état de Van der Waals cette construction a une interprétation géométrique connue sous le nom de «règle des aires» ou «construction de Maxwell» : l'horizontale doit être construite de façon à ce que la surface \mathcal{A} soit égale à la surface \mathcal{B} (cf. figure 2.13b). C'est ainsi que sont déterminés les points m et M . La ligne qui relie $(m, P(m))$ et $(M, P(M))$ est dite «ligne de Maxwell» : le long de cette ligne les deux phases coexistent à l'équilibre. En effet, puisque $dg = \tau dP - s dT$, en intégrant à une température fixée on obtient

$$g(P, T) = \int \tau dP + \Phi(T)$$

où $\Phi(T)$ est une fonction arbitraire de la température. Donc $g^{\text{liq}} = g^{\text{vap}}$ si et seulement si

$$\begin{cases} \int_m^M P(\tau) d\tau = P(m)(M - m), \\ P(m) = P(M), \end{cases} \quad \forall T < T_c.$$

Refaisant la même chose avec toutes les isothermes on définit littéralement le dôme

de saturation en fixant sa frontière³.

Notons qu'il n'y a pas de calcul analytique simple de m et M , ce qui constitue la principale difficulté de cette équation d'état.

³Bien évidemment cette construction ne tient pas compte des points de métastabilité (ces points, au contraire des ceux dans la zone spinodale, sont physiques).

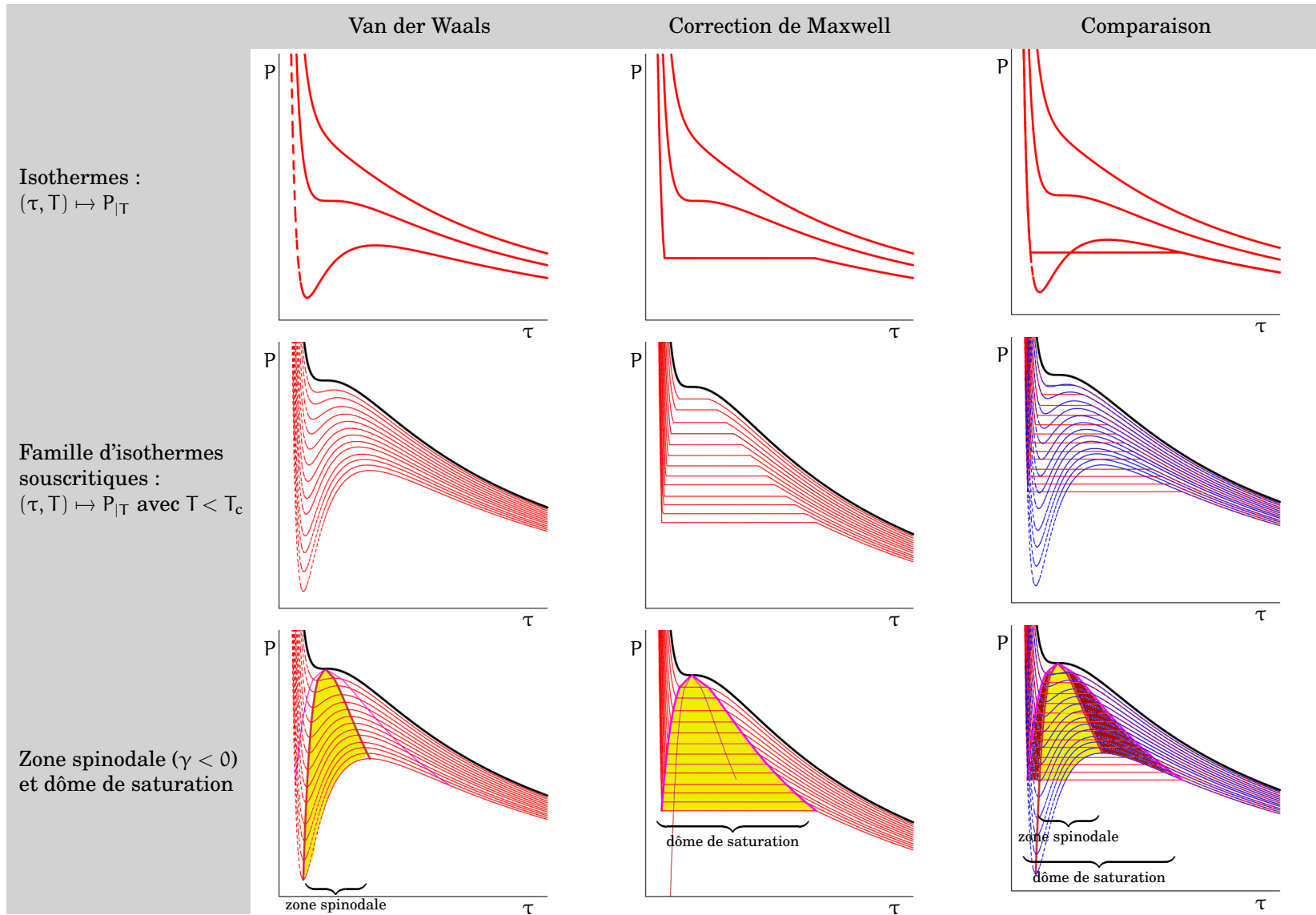


FIG. 2.14.: Loi de Van der Waals et correction de Maxwell : synthèse

Annexe 2.B Transformée de Legendre-Fenchel

On a vu que la transformée de Legendre-Fenchel est beaucoup utilisée en thermodynamique, d'une part pour la définition des potentiels thermodynamiques (dont le potentiel de Gibbs, fondamental pour la définition de la loi de changement de phase), d'autre part pour la construction de l'entropie à l'équilibre qui est définie grâce à l'inf-convolution, cette dernière étant une opération liée à la transformée de Legendre-Fenchel comme on verra ci-dessous.

On rappelle donc ici brièvement quelques notions portant sur cette opération. Ces rappels sont effectués dans le but d'introduire la notation utilisée et d'aider le lecteur à mieux suivre les définitions du chapitre (pour plus de détails et pour les démonstrations voir par exemple Azé [4], Hiriart-Urruty et Lemaréchal [52–54] ou encore Baus et Tejero [12], Callen [20], Greiner *et al.* [44], Linder [73], Lott [75], Winterbone [97]).

Soit X un espace normé dont le dual topologique est noté X^* .

☞ **DÉFINITION 2.11.** Soit $f: X \rightarrow \overline{\mathbb{R}} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{R} \cup \{\pm\infty\}$ une fonction. La transformée de Legendre-Fenchel (ou conjuguée) de f est la fonction $f^*: X^* \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ définie par

$$f^*(\ell) \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{u \in X} \{\ell(u) - f(u)\} \quad \text{pour tout } \ell \in X^* .$$

Si $(X, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ est un espace de Hilbert identifié à son dual, la conjuguée de la fonction $f: X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ est la fonction $f^*: X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ définie par

$$f^*(v) \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{u \in X} \{\langle u, v \rangle - f(u)\} \quad \text{pour tout } v \in X .$$

Donc la transformée de Legendre ou conjugué de Fenchel d'une fonction $f: \mathbb{R} \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ est simplement définie comme

$$f^*(\mathbf{y}) \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \{\mathbf{y} \cdot \mathbf{x} - f(\mathbf{x})\} \quad \text{pour tout } \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n .$$

On a les propriétés suivantes :

- ☛ f^* est convexe et semi-continue inférieurement : $\lim_{y' \rightarrow y} g(y') \geq g(y)$;
- ☛ si $f: X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ est une fonction, alors $f^{***} = f^*$;
- ☛ f est convexe et semi-continue inférieurement si et seulement si $f = f^{**}$.

☞ **EXEMPLE 1** La transformée de Legendre de la fonction

$$\begin{aligned} f: \mathbb{R} &\rightarrow \overline{\mathbb{R}} \\ x &\rightarrow \exp(x), \end{aligned}$$

est la fonction

$$f^*: \mathbb{R} \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$$

$$y \rightarrow \sup_{x \in \mathbb{R}} (yx - \exp(x)) = \begin{cases} +\infty & \text{si } y < 0, \\ 0 & \text{si } y = 0, \\ y(1 - \ln y) & \text{si } y > 0. \end{cases} \quad \heartsuit$$

Inf-convolution

☞ **DÉFINITION 2.12.** Soit X un espace vectoriel et soient $f, g: X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ deux fonctions. L'inf-convolution (ou somme épigraphique) de f et g est la fonction $f \square g: X \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$ définie pour tout $x \in X$ par

$$(f \square g)(x) \stackrel{\text{def}}{=} \inf_{z \in X} \{f(z) + g(x - z)\} = \inf_{x_1 + x_2 = x} \{f(x_1) + g(x_2)\}.$$

Si f et g sont deux fonctions convexes, alors $f \square g$ est convexe. Par ailleurs, si f et g sont deux fonctions convexes propres définies sur un espace normé, alors $(f \square g)^* = f^* + g^*$. Puisque $(f \square g)^*$ est convexe et semi-continue inférieurement, elle est involutive. On en déduit que

$$(f \square g)(x) = (f \square g)^{**}(x) = (f^* + g^*)^*.$$

☞ **EXEMPLE 2** Considérons l'opposée de l'entropie volumique de la phase α , c'est-à-dire la fonction

$$(-S_\alpha): \mathcal{Q}_\alpha(\mathbf{W}) \rightarrow \overline{\mathbb{R}}$$

avec $\mathbf{W} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, \varepsilon)$ fixé et

$$\mathcal{Q}_\alpha(\mathbf{W}) \stackrel{\text{def}}{=} \{(y_\alpha, \tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \mid 0 \leq y_\alpha \leq 1, 0 \leq \tau_\alpha \leq \tau, 0 \leq \varepsilon_\alpha \leq \varepsilon\}.$$

Alors

$$\max_{\begin{pmatrix} y \\ y \tau_1 \\ y \varepsilon_1 \end{pmatrix} \in \mathcal{Q}_1(\mathbf{W})} \left\{ S_1 \left(\begin{pmatrix} y \\ y \tau_1 \\ y \varepsilon_1 \end{pmatrix} \right) + S_2 \left(\begin{pmatrix} 1-y \\ \tau-y \tau_1 \\ \varepsilon-y \varepsilon_1 \end{pmatrix} \right) \right\} = (-S_1) \square (-S_2) = ((-S_1)^* + (-S_2)^*)^*$$

et

$$\text{co}(\max\{S_1, S_2\}) = (\max\{S_1, S_2\})^{**}$$

où $\text{co}(\star)$ indique l'enveloppe concave de \star . \heartsuit

Interprétation géométrique de la transformée de Legendre

La transformée de Legendre introduite ci-dessus permet, de façon générale, d'obtenir toutes les fonctions d'état décrivant un système à l'aide d'autres variables d'état.

Fonctions d'une seule variable Géométriquement parlant, la transformée de Legendre consiste, en partant d'une courbe $y = y(x)$, à considérer l'ordonnée y_0 à l'origine

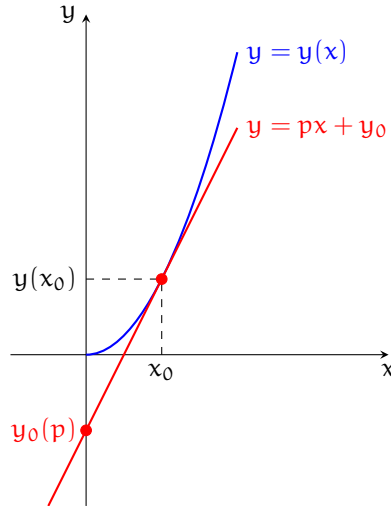


FIG. 2.15.: Construction géométrique de la transformée de Legendre

de la tangente à la courbe $y(x)$ en x

$$y_0 = y - \frac{dy}{dx}x,$$

puis à remplacer le couple de variables (x, y) par le couple (p, y_0) où p est la dérivée de la courbe y en x . Ceci revient à décrire la courbe $y(x)$ par la famille des tangentes en chacun de ses points. Autrement dit, $y(x)$ est la courbe enveloppe des tangentes définies par l'ensemble des couples (p, y_0) . Ainsi, partant de la fonction d'état y de la variable x , on aboutit à la définition d'une autre fonction d'état y_0 de la variable p dite «variable conjuguée de x ».

Voyons cette construction plus en détail : soit $y(x)$ une fonction de la variable x avec différentielle totale

$$dy = \frac{dy}{dx} dx \stackrel{\text{def}}{=} p(x) dx.$$

La fonction $p \stackrel{\text{def}}{=} y'(x)$ donne la pente de la courbe $y(x)$ pour tout x (on suppose que $y(x)$ est différentiable pour tout x). Le rôle de la transformée de Legendre est de trouver une fonction $y(p)$ de la nouvelle variable p qui soit équivalente à la fonction $y(x)$, c'est-à-dire qui contient les mêmes informations.

Si on élimine x de cette équation, c'est-à-dire si l'on considère x comme une fonction de p , on peut substituer $x: p \mapsto x(p)$ dans la première équation et on obtient $y = y(x(p)) = y(p)$, qui est une équation différentielle du premier ordre dont la solution contient une constante d'intégration arbitraire. Puisque seulement pour une certaine valeur de la constante d'intégration on retrouve la fonction $y = y(x)$, les fonctions $p \mapsto y(p)$ et $x \mapsto y(x)$ ne sont pas équivalentes. Toutefois, il est possible de trouver une transformation de la fonction $y = y(x)$ dans une autre fonction équivalente dans laquelle p est la variable indépendante.

Pour cela, observons qu'une courbe est définie soit par un ensemble de points (x, y)

tels que $y = y(x)$, soit par l'enveloppe concave de la courbe. Ce dernier est constitué par l'ensemble de points (p, y_0) , où y_0 est l'ordonnée à l'origine de la droite de pente $p = y'(x)$ tangente à la courbe en le point x (voir la figure 2.15 à la page précédente). Puisque l'équation de la tangente à la courbe passant par le point (x, y) a pour équation

$$y = px + y_0,$$

la courbe est complètement caractérisée par l'intersection de la tangente avec l'axe des ordonnées, c'est-à-dire par la fonction

$$y_0(p) = y(p) - px(p), \quad (2.33)$$

où $x(p)$ est obtenue en éliminant x de l'équation $p = y'(x)$ et $y(p)$ est la fonction

$$y = y(x(p)) \equiv y(p). \quad (2.34)$$

La transformation (2.33), grâce à laquelle la fonction $x \mapsto y(x)$ est remplacée par la fonction $p \mapsto y_0(p)$ (dans laquelle la dérivée de la fonction originale est la variable indépendante), est une transformée de Legendre. La fonction $p \mapsto y_0(p) = y(p) - px(p)$ est la transformée de Legendre de la fonction $x \mapsto y(x)$.

En différenciant l'équation (2.33) on obtient

$$dy_0 = dy - p dx - x dp = -x dp,$$

ainsi

$$x = -y'_0(p). \quad (2.35)$$

☞ **EXEMPLE 3** Considérons la fonction $x \mapsto y(x) = x^2$. Alors $p = y'(x) = 2x$, d'où $y_0(p) = x^2 - px$ avec $x = p/2$. Donc on a $y_0(p) = p^2/4 - p^2/2 = -p^2/4$ et $dy_0 = -p/2 dp = -x dp$. ♡

☞ **EXEMPLE 4** Considérons la fonction $x \mapsto y(x) = \exp(x)$. Alors $p = y'(x) = \exp(x)$, d'où $y_0(p) = \exp(x) - px$ avec $x = \ln p$. Donc on a $y_0(p) = p(1 - \ln p)$ et $dy_0 = -\ln p dp = -x dp$. ♡

☞ **EXEMPLE 5** Considérons la fonction $x \mapsto y(x) = \ln(x)$. Alors $p = y'(x) = \frac{1}{x}$, d'où $y_0(p) = \ln(x) - px$ avec $x = \frac{1}{p}$. Donc on a $y_0(p) = -(1 + \ln p)$ et $dy_0 = -\frac{1}{p} dp = -x dp$. ♡

La transformée de Legendre inverse de la fonction $y_0(p)$ s'obtient en éliminant la dérivée $p = y'(x)$ dans l'équation (2.35), ainsi $y(x)$ peut s'écrire, en accord avec la définition (2.33), comme

$$y(x) = y_0(y'(x)) + xy'(x),$$

qui est la fonction du départ.

Fonctions de n variables La construction précédente s'étend facilement au cas où $y = y(x_1, \dots, x_n)$ est une fonction de n variables. Si on pose

$$p_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial y(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_k}, \quad k = 1, \dots, n, \quad (2.36)$$

différentes transformées de Legendre peuvent être définies, dépendantes de la dérivée partielle (2.36) qu'on veut prendre comme variable indépendante.

Soient $s \leq n$ ces variables. Notons $y(x_1, \dots, x_n) \stackrel{\text{def}}{=} y(\{x_s\}; \{x_{n-s}\})$ où $\{x_s\}$ désigne l'ensemble des variables qui doivent être remplacées par leur dérivées $\{p_s\}$ dans la transformée de Legendre et $\{x_{n-s}\}$ désigne l'ensemble des variables qui ne sont pas touchées par la transformée. Alors la transformée de Legendre partielle de la fonction $y(\{x_s\}; \{x_{n-s}\})$ est définie par

$$y_0(\{p_s\}; \{x_{n-s}\}) = y(\{p_s\}; \{x_{n-s}\}) - \sum_{k=1}^s p_k x_k(\{p_s\}; \{x_{n-s}\}), \quad (2.37)$$

où les $x_k(\{p_s\}; \{x_{n-s}\})$ sont obtenus par élimination des variables x_k ($k = 1, \dots, s$) à partir de la (2.36) en fonction des dérivées $\{p_s\}$ et des $n - s$ variables restantes $\{x_{n-s}\}$; la fonction $y(\{p_s\}; \{x_{n-s}\})$ est donc

$$y(\{p_s\}; \{x_{n-s}\}) = y(x_s(\{p_s\}; \{x_{n-s}\}); \{x_{n-s}\}). \quad (2.38)$$

En différenciant la relation (2.37) on trouve

$$dy_0 = dy - \sum_{k=1}^s [p_k dx_k + x_k dp_k] = \sum_{i=n-s}^n p_i dx_i - \sum_{k=1}^s x_k dp_k, \quad (2.39)$$

ainsi

$$x_k = \frac{\partial y_0(\{p_s\}; \{x_{n-s}\})}{\partial p_k}, \quad k = 1, \dots, s. \quad (2.40)$$

☞ **EXEMPLE 6** Considérons la fonction $\mathbf{x} \stackrel{\text{def}}{=} (x_1, x_2) \mapsto y(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2$. Alors $p_1 = 2x_1$ et $p_2 = 2x_2$, d'où $y_0(p) = (p_1/2)^2 + (p_2/2)^2 - p_1^2/2 - p_2^2/2$ car $x_k = p_k/2$. Donc on a $y_0(p) = -p_1^2/4 - p_2^2/4$ et $dy_0 = -p_1/2 dp_1 - p_2/2 dp_2 = -x_1 dp_1 - x_2 dp_2$. ♡

2.B.1 Principaux potentiels thermodynamiques (Greiner *et al.* (44, pp. 90-109))

Les potentiels thermodynamiques sont les transformées de Legendre de l'équation d'état complète $(\tau, s) \mapsto \varepsilon$. Ils permettent d'exprimer cette équation dans d'autres jeux de variables.

Comme on a vu dans ce chapitre, si on considère l'équation d'état complète $(\tau, s) \mapsto \varepsilon$, alors

$$d\varepsilon = T ds - P d\tau. \quad (2.41)$$

Remarquons que, puisque ε est une fonction d'état, ainsi que s et τ , la forme différen-

tielle (2.41) est toujours valide, quelle que soit la transformation considérée.

- ☛ Si on souhaite travailler avec la pression P plutôt qu'avec le volume τ , on introduit alors la transformée de Legendre partielle correspondante pour obtenir une nouvelle fonction d'état $(P, s) \mapsto h$, nommée «enthalpie», définie par

$$h = \varepsilon(\tau, s) + P\tau \quad (2.42)$$

où τ est fonction des variables (P, s) et elle est calculée comme la solution de l'équation $P = -\left.\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau}\right|_s$. Donc h a comme différentielle

$$\begin{aligned} dh &= d\varepsilon + P d\tau + \tau dP = \\ &= T ds + \tau dP \end{aligned}$$

et

$$T = \left.\frac{\partial h}{\partial s}\right|_P, \quad \tau = \left.\frac{\partial h}{\partial P}\right|_s.$$

- ☛ Sinon on peut également vouloir travailler avec la température T plutôt que l'entropie s et l'on introduit alors la transformée de Legendre partielle correspondante pour obtenir une nouvelle fonction d'état $(\tau, T) \mapsto f$, appelée «énergie libre» ou «potentiel de Helmholtz», définie par

$$f = \varepsilon(\tau, s) - Ts \quad (2.43)$$

où s est fonction des variables (τ, T) et elle est calculée comme la solution de l'équation $T = \left.\frac{\partial \varepsilon}{\partial s}\right|_\tau$. Donc f a comme différentielle

$$\begin{aligned} df &= d\varepsilon - s dT - T ds = \\ &= -s dT - P d\tau \end{aligned}$$

et

$$s = -\left.\frac{\partial f}{\partial T}\right|_\tau, \quad P = -\left.\frac{\partial f}{\partial \tau}\right|_T.$$

- ☛ Enfin, si on souhaite travailler avec les variables T et P , on introduit l'«enthalpie libre» g , appelée aussi «potentiel de Gibbs», définie par

$$g = \varepsilon(\tau, s) - Ts + P\tau, \quad (2.44)$$

où τ et s sont fonctions des variables (P, T) et sont calculées comme la solution du système

$$\begin{cases} P = -\left.\frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau}\right|_s, \\ T = \left.\frac{\partial \varepsilon}{\partial s}\right|_\tau. \end{cases}$$

Donc g a comme différentielle

$$dg = d\varepsilon - T ds - s dT + P d\tau + \tau dP =$$

$$= -s dT + \tau dP$$

et

$$s = - \left. \frac{\partial g}{\partial T} \right|_P, \quad \tau = \left. \frac{\partial g}{\partial P} \right|_T.$$

★ **REMARQUE 2.5 (CALLEN (20, p.221)).** Dans les transitions de phase du premier ordre, non seulement l'énergie interne ε , le volume τ et l'entropie s molaires sont discontinues lorsqu'on passe d'une phase à l'autre (cf. définition 2.2 à la page 34 et hypothèse 2.5 à la page 49), mais aussi les potentiels f et h (tandis que les potentiels de Gibbs g des deux phases sont égaux). ❀

★ **REMARQUE 2.6 (ÉQUATION DE GIBBS-HELMHOLTZ).** Le potentiel de Gibbs et ses dérivées par rapport à la température peuvent être liés à l'enthalpie via l'équation de Gibbs-Helmholtz suivante

$$h = g - T \left. \frac{\partial g}{\partial T} \right|_P = -T^2 \left. \frac{\partial \left(\frac{g}{T} \right)}{\partial T} \right|_P. \quad (2.45)$$

En effet, à partir des définitions $h = \varepsilon + P\tau$ et $g = \varepsilon + P\tau - Ts$ on déduit que

$$h = g + Ts.$$

Si on considère la différentielle totale du potentiel de Gibbs

$$dg = -s dT + \tau dP$$

on a

$$s = - \left. \frac{\partial g}{\partial T} \right|_P$$

d'où

$$h = g - T \left. \frac{\partial g}{\partial T} \right|_P.$$

Puisque

$$\left. \frac{\partial \left(\frac{g}{T} \right)}{\partial T} \right|_P = \frac{1}{T} \left. \frac{\partial g}{\partial T} \right|_P - \frac{g}{T^2} = -\frac{1}{T} \left(g - T \left. \frac{\partial g}{\partial T} \right|_P \right)$$

on conclut que

$$h = -T^2 \left. \frac{\partial \left(\frac{g}{T} \right)}{\partial T} \right|_P$$

d'où la (2.45). ❀

Les potentiels thermodynamiques étant des différentielles totales exactes, on peut en déduire un certain nombre de relations entre les variables d'états et les dérivées de ces potentiels thermodynamiques, comme par exemple les relations de Maxwell (voir le tableau 2.1 à la page 73 pour un récapitulatif).

Relations de Maxwell

Un certain nombre de relations entre les variables d'état peuvent être dérivées en partant du fait que l'énergie ε et les potentiels thermodynamiques f , h et g sont des

fonctions d'état, c'est-à-dire du fait qu'ils ont des différentielles totales exactes.

En effet, soit $\psi: (X, Y) \mapsto \psi$ une fonction d'état. Alors

$$d\psi = \left. \frac{\partial \psi}{\partial X} \right|_Y dX + \left. \frac{\partial \psi}{\partial Y} \right|_X dY$$

et

$$\left. \frac{\partial \left(\left. \frac{\partial \psi}{\partial Y} \right|_X \right)}{\partial X} \right|_Y = \left. \frac{\partial \left(\left. \frac{\partial \psi}{\partial X} \right|_Y \right)}{\partial Y} \right|_X,$$

c'est-à-dire

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial X \partial Y} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial Y \partial X}.$$

L'application de cette propriété aux potentiels thermodynamiques permet de déterminer les «Relations de Maxwell» comme ci-dessous illustré.

☛ La différentielle totale de l'énergie s'écrit

$$d\varepsilon = T ds - P d\tau = \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} \right|_\tau ds + \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} \right|_s d\tau.$$

Puisque

$$\left. \frac{\partial \left(\left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} \right|_s \right)}{\partial s} \right|_\tau = \left. \frac{\partial \left(\left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} \right|_\tau \right)}{\partial \tau} \right|_s$$

il suit immédiatement que

$$\left. \frac{\partial T}{\partial \tau} \right|_s = - \left. \frac{\partial P}{\partial s} \right|_\tau.$$

Bien évidemment T et P doivent être considérés comme fonctions de s et τ .

☛ De la même façon on a

$$df = -s dT - P d\tau = \left. \frac{\partial f}{\partial T} \right|_\tau dT + \left. \frac{\partial f}{\partial \tau} \right|_T d\tau.$$

Puisque

$$\left. \frac{\partial \left(\left. \frac{\partial f}{\partial T} \right|_\tau \right)}{\partial \tau} \right|_T = \left. \frac{\partial \left(\left. \frac{\partial f}{\partial \tau} \right|_T \right)}{\partial T} \right|_\tau$$

il s'ensuit que

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_T = \left. \frac{\partial P}{\partial T} \right|_\tau$$

où s et P sont fonctions de T et τ .

☛ Pareillement

$$dh = T ds + \tau dP = \left. \frac{\partial h}{\partial s} \right|_P ds + \left. \frac{\partial h}{\partial P} \right|_s dP.$$

Puisque

$$\left. \frac{\partial \left(\left. \frac{\partial h}{\partial P} \right|_s \right)}{\partial P} \right|_s = \left. \frac{\partial \left(\left. \frac{\partial h}{\partial s} \right|_P \right)}{\partial s} \right|_P$$

on a que

$$\left. \frac{\partial T}{\partial P} \right|_s = \left. \frac{\partial \tau}{\partial s} \right|_P$$

où P et τ sont fonctions de T et s .

☛ Enfin

$$dg = -s dT + \tau dP = \left. \frac{\partial g}{\partial T} \right|_P dT + \left. \frac{\partial g}{\partial P} \right|_T dP.$$

Puisque

$$\left. \frac{\partial \left(\left. \frac{\partial g}{\partial T} \right|_P \right)}{\partial P} \right|_T = \left. \frac{\partial \left(\left. \frac{\partial g}{\partial P} \right|_T \right)}{\partial T} \right|_P$$

on déduit que

$$-\left. \frac{\partial s}{\partial P} \right|_T = \left. \frac{\partial \tau}{\partial T} \right|_P$$

où s et τ sont fonctions de T et P .

☛ Rappelons qu'il est aussi possible d'écrire l'entropie s , qui est une fonction d'état, comme une fonction de τ et ε . Sa différentielle est donc exacte et on obtient

$$ds = \frac{1}{T} d\varepsilon + \frac{P}{T} d\tau = \left. \frac{\partial s}{\partial \varepsilon} \right|_\tau d\varepsilon + \left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_\varepsilon d\tau.$$

Puisque

$$\left. \frac{\partial \left(\left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_\varepsilon \right)}{\partial \varepsilon} \right|_\tau = \left. \frac{\partial \left(\left. \frac{\partial s}{\partial \varepsilon} \right|_\tau \right)}{\partial \tau} \right|_\varepsilon$$

on déduit immédiatement que

$$\left. \frac{\partial \left(\frac{1}{T} \right)}{\partial \tau} \right|_\varepsilon = - \left. \frac{\partial \left(\frac{P}{T} \right)}{\partial \varepsilon} \right|_\tau.$$

Bien évidemment T et P doivent être considérés comme fonctions de ε et τ .

Carré thermodynamique Le «carré thermodynamique», qu'on voit en figure 2.16 à la page suivante, a été conçu pour mémoriser simplement l'ensemble de ces relations (différentielles des potentiels thermodynamiques et relations de Maxwell).⁴

Le long des quatre cotés on écrit les quatre potentiels thermodynamiques f , g , h et ε , disposés en ordre alphabétique et en sens horaire, à partir de f mit sur le coté haut. Aux deux coins de gauche on pose les variables extensives τ et s tandis qu'aux coins de droite on pose les variables intensives P et T .

Chacun des quatre potentiels thermodynamiques se trouve entre les variables indépendantes des quelles il est fonction naturelle. On a donc que ε est fonction naturelle de τ et s ; f de τ et T etc.

Ce carré permet de lire facilement les dérivées partielles qui lient les potentiels aux variables naturelles respectives : plus précisément, la dérivée partielle d'un potentiel

⁴Ce diagramme fut présenté pour la première fois par le professeur Max Born en 1929 pendant un séminaire fait par le professeur Tisza. Pour plus d'information voir Callen [20, page 183].

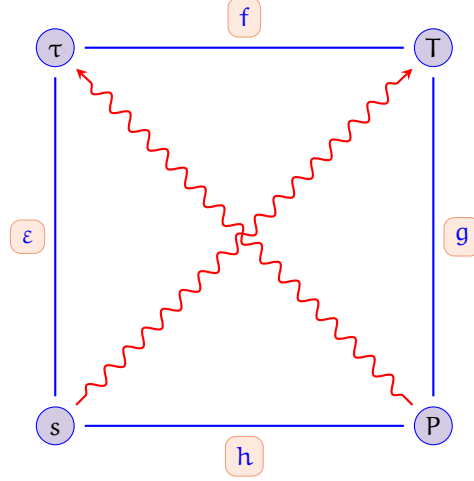


FIG. 2.16.: Carré thermodynamique

par rapport à une variable (coin) est donnée simplement par la variable qui se trouve au coin opposé et les flèches diagonales en déterminent le signe (positif dans la direction de la flèche, négatif sinon). Par exemple, on a $(\tau, T) \mapsto f$ et $\frac{\partial f}{\partial \tau}|_T = -P$ mais $(P, T) \mapsto g$ et $\frac{\partial g}{\partial P}|_T = \tau$.

Même les relations de Maxwell peuvent se lire sur le schéma : la dérivée de la variable (coin) par rapport à la variable sur la même arête (en considérant constante la variable dans la diagonale opposée) est égale à la dérivée le long de l'autre diagonale. De nouveau, les signes doivent être choisis selon la direction des diagonales. Par exemple $\frac{\partial \tau}{\partial s}|_P = \frac{\partial T}{\partial P}|_s$ mais $\frac{\partial T}{\partial \tau}|_s = -\frac{\partial P}{\partial s}|_\tau$.

Chaleurs molaires et autres dérivées partielles Un certain nombre de dérivées secondes sont très utiles dans les calculs de thermodynamique. Ici on rappelle la définition de quatre d'entre elles dont on aura besoin par la suite. Pour une revue complète on pourra consulter un bon livre de thermodynamique, comme par exemple Callen [19; 20], Greiner *et al.* [44] etc.

- ① Coefficient d'expansion thermique

$$\alpha \stackrel{\text{déf}}{=} \frac{1}{\tau} \frac{\partial \tau}{\partial T} \Big|_P.$$

- ② Coefficient de compressibilité isotherme

$$\kappa_T \stackrel{\text{déf}}{=} -\frac{1}{\tau} \frac{\partial \tau}{\partial P} \Big|_T.$$

- ③ Chaleur molaire à pression constante

$$c_P \stackrel{\text{déf}}{=} T \frac{\partial s}{\partial T} \Big|_P.$$

TAB. 2.1.: Potentiels thermodynamiques et relations de Maxwell

Potentiel	Forme différentielle	Variables conjuguées		Relation de Maxwell
Énergie interne $(s, \tau) \mapsto \varepsilon$	$d\varepsilon = T ds - P d\tau$	$T = \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} \right _{\tau}$	$P = - \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} \right _s$	$\left. \frac{\partial T}{\partial \tau} \right _s = - \left. \frac{\partial P}{\partial s} \right _{\tau}$
Entropie $(\varepsilon, \tau) \mapsto s$	$ds = \frac{1}{T} d\varepsilon + \frac{P}{T} d\tau$	$\frac{1}{T} = \left. \frac{\partial s}{\partial \varepsilon} \right _{\tau}$	$\frac{P}{T} = \left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right _{\varepsilon}$	$\left. \frac{\partial (\frac{1}{T})}{\partial \tau} \right _{\varepsilon} = - \left. \frac{\partial (\frac{P}{T})}{\partial \varepsilon} \right _{\tau}$
Enthalpie $(s, P) \mapsto h = \varepsilon + P\tau$	$dh = T ds + \tau dP$	$T = \left. \frac{\partial h}{\partial s} \right _P$	$\tau = \left. \frac{\partial h}{\partial P} \right _s$	$\left. \frac{\partial T}{\partial P} \right _s = \left. \frac{\partial \tau}{\partial s} \right _P$
Énergie libre $(T, \tau) \mapsto f = \varepsilon - Ts$	$df = -s dT - P d\tau$	$s = - \left. \frac{\partial f}{\partial T} \right _{\tau}$	$P = - \left. \frac{\partial f}{\partial \tau} \right _T$	$\left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right _T = \left. \frac{\partial P}{\partial T} \right _{\tau}$
Enthalpie libre $(T, P) \mapsto g = \varepsilon - Ts + P\tau$	$dg = -s dT + \tau dP$	$s = - \left. \frac{\partial g}{\partial T} \right _P$	$\tau = \left. \frac{\partial g}{\partial P} \right _T$	$\left. \frac{\partial s}{\partial P} \right _T = - \left. \frac{\partial \tau}{\partial T} \right _P$

④ Chaleur molaire à volume constant

$$c_v \stackrel{\text{def}}{=} T \left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{\tau}.$$

★ **REMARQUE 2.7.** Si la transformée de Legendre introduit des nouvelles fonctions (potentiels thermodynamiques), parfois on a juste besoin d'écrire une même fonction avec d'autres variables. Dans ce cas il faut pouvoir s'assurer de la licéité du changement de variable. Par exemple, dans tout ce chapitre on a travaillé avec l'entropie s comme une fonction du volume τ et de l'énergie interne ε . Toutefois, il est rare d'avoir accès à ces variables dans les tables thermodynamique ; il est plus probable que l'on puisse trouver des fonctions de la pression et de la température. Or, le jacobien de la transformation $(\tau, \varepsilon) \rightarrow (P, T)$ est

$$J(\tau, \varepsilon) = \begin{vmatrix} \left. \frac{\partial T}{\partial \tau} \right|_{\varepsilon} & \left. \frac{\partial T}{\partial \varepsilon} \right|_{\tau} \\ \left. \frac{\partial P}{\partial \tau} \right|_{\varepsilon} & \left. \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} \right|_{\tau} \end{vmatrix} = \left. \frac{\partial T}{\partial \varepsilon} \right|_{\tau} \left. \frac{\partial P}{\partial \tau} \right|_{\varepsilon} - \left. \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} \right|_{\tau} \left. \frac{\partial T}{\partial \tau} \right|_{\varepsilon}.$$

Dans une phase pure on a bien évidemment $J(\tau, \varepsilon) \neq 0$. En revanche, lorsque (τ, ε) est un état de mélange à l'équilibre, P est fonction de T et on voit que

$$J(\tau, \varepsilon) = \left. \frac{\partial T}{\partial \tau} \right|_{\varepsilon} \left. \frac{dP}{dT} \right|_{\varepsilon} \left. \frac{\partial T}{\partial \varepsilon} \right|_{\tau} - \left. \frac{dP}{dT} \right|_{\varepsilon} \left. \frac{\partial T}{\partial \tau} \right|_{\varepsilon} \left. \frac{\partial T}{\partial \varepsilon} \right|_{\tau} = 0.$$

Il en ressort que si un état (τ, ε) de mélange à l'équilibre n'est pas déterminé complètement par le couple (T, P) (car (T, P) caractérise tout le segment r_{12} et non seulement un état), il l'est complètement par l'un des couples suivants qui sont en correspondance biunivoque avec (τ, ε) :

$$(\tau, s), \quad (\tau, T), \quad (\tau, P), \quad (P, \varepsilon), \quad (P, s).$$

En revanche, on a un difféomorphisme avec le couple (y, T) ou (y, P) (voir la proposition 2.10). ❀

➡ **PROPOSITION 2.10:**

Dans le dôme de saturation, c'est-à-dire pour les états (τ, s) de mélange à l'équilibre, le changement de variables

$$(y, T) \mapsto (\tau, s)$$

est un difféomorphisme. ◇

PREUVE.

Rappelons que pour tout (τ, s) état de mélange à l'équilibre on a les relations constitu-

tives

$$\begin{cases} \tau = \sum_{\alpha=1,2} y_{\alpha} \tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T) & (2.46a) \\ s = \sum_{\alpha=1,2} y_{\alpha} s_{\alpha}^{\text{sat}}(T) & (2.46b) \\ 1 = \sum_{\alpha=1,2} y_{\alpha} & (2.46c) \end{cases}$$

avec $\star_{\alpha}^{\text{sat}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \star_{\alpha}(T, \text{psat}(T))$.

Pour que le changement de variables soit un difféomorphisme il suffit de montrer que le déterminant de la jacobienne du changement de variables est non nul :

$$\begin{aligned} J \stackrel{\text{def}}{=} \begin{vmatrix} \left. \frac{\partial \tau}{\partial y} \right|_T & \left. \frac{\partial \tau}{\partial T} \right|_y \\ \left. \frac{\partial s}{\partial y} \right|_T & \left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_y \end{vmatrix} &= (\tau_1^{\text{sat}}(T) - \tau_2^{\text{sat}}(T)) \sum_{\alpha=1,2} y_{\alpha} \frac{ds_{\alpha}^{\text{sat}}(T)}{dT} - \\ &- (s_1^{\text{sat}}(T) - s_2^{\text{sat}}(T)) \sum_{\alpha=1,2} y_{\alpha} \frac{d\tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T)}{dT}. \end{aligned}$$

En utilisant la relation de Clausius-Clapeyron (2.6) $\frac{d\text{psat}(T)}{dT} = \frac{s_1^{\text{sat}}(T) - s_2^{\text{sat}}(T)}{\tau_1^{\text{sat}}(T) - \tau_2^{\text{sat}}(T)}$, il se réécrit comme

$$J = (\tau_1^{\text{sat}}(T) - \tau_2^{\text{sat}}(T)) \sum_{\alpha=1,2} y_{\alpha} \mathcal{M}_{\alpha}$$

où

$$\mathcal{M}_{\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{ds_{\alpha}^{\text{sat}}(T)}{dT} - \frac{d\text{psat}(T)}{dT} \frac{d\tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T)}{dT}.$$

Puisque J est une combinaison convexe (car $J = y_1 \mathcal{M}_1 + (1 - y_1) \mathcal{M}_2$), il suffit de montrer que $\mathcal{M}_{\alpha} > 0$. On a

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{ds_{\alpha}^{\text{sat}}(T)}{dT} - \frac{d\text{psat}(T)}{dT} \frac{d\tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T)}{dT} &= \\ &= \left. \frac{\partial s_{\alpha}}{\partial T} \right|_p + \frac{d\text{psat}(T)}{dT} \left. \frac{\partial s_{\alpha}}{\partial P} \right|_T - \frac{d\text{psat}(T)}{dT} \left(\left. \frac{\partial \tau_{\alpha}}{\partial T} \right|_p + \frac{d\text{psat}(T)}{dT} \left. \frac{\partial \tau_{\alpha}}{\partial P} \right|_T \right). \end{aligned}$$

Sachant que

$$\left. \frac{\partial s_{\alpha}}{\partial T} \right|_p = \frac{c_{p,\alpha}}{T} > 0 \quad (\text{Callen [19, p. 129]})$$

$$\left. \frac{\partial s_{\alpha}}{\partial P} \right|_T = - \left. \frac{\partial \tau_{\alpha}}{\partial T} \right|_p \quad (\text{voir tableau 2.1 à la page 73})$$

$$\left. \frac{\partial \tau_{\alpha}}{\partial T} \right|_p = \tau_{\alpha} a_{\alpha} \quad (\text{Callen [19, p. 129]})$$

$$\left. \frac{\partial \tau_{\alpha}}{\partial P} \right|_T = -\tau_{\alpha} \kappa_{T,\alpha} < 0 \quad (\text{Callen [19, p. 135]})$$

on obtient

$$\mathcal{M}_{\alpha} = \frac{c_{p,\alpha}}{T} - 2\tau_{\alpha} a_{\alpha} \frac{d\text{psat}(T)}{dT} + \tau_{\alpha} \left(\frac{d\text{psat}(T)}{dT} \right)^2 (\kappa_{T,\alpha})^2.$$

On sait que

$$c_{p_\alpha} = c_{v_\alpha} + T\tau_\alpha \frac{a_\alpha^2}{\kappa_{T_\alpha}}$$

avec $c_{v_\alpha} > 0$ donc

$$\mathcal{M}_\alpha = \frac{c_{v_\alpha}}{T} + \frac{\tau_\alpha}{\kappa_{T_\alpha}} \left(a_\alpha - \frac{dp^{\text{sat}}(T)}{dT} \kappa_{T_\alpha} \right)^2 > 0,$$

ce qui conclut la preuve. ♦

Autres formules utiles

Rappelons ici certaines identités qui seront utilisées dans les chapitres qui suivent :

$$\left. \frac{\partial X}{\partial Y} \right|_Z \left. \frac{\partial Y}{\partial X} \right|_Z = 1 \quad (2.47)$$

$$\left. \frac{\partial X}{\partial Y} \right|_Z \left. \frac{\partial Y}{\partial W} \right|_Z = \left. \frac{\partial X}{\partial W} \right|_Z \quad (2.48)$$

$$\left. \frac{\partial X}{\partial Y} \right|_Z \left. \frac{\partial Z}{\partial X} \right|_Y \left. \frac{\partial Y}{\partial Z} \right|_X = -1. \quad (2.49)$$

Si l'on prend par exemple l'équation d'état $P = P(\tau, T)$ alors on a

$$\left. \frac{\partial P}{\partial \tau} \right|_T \left. \frac{\partial \tau}{\partial T} \right|_P \left. \frac{\partial T}{\partial P} \right|_\tau = -1$$

et donc

$$\left. \frac{\partial \tau}{\partial T} \right|_P = - \frac{\left. \frac{\partial P}{\partial T} \right|_\tau}{\left. \frac{\partial P}{\partial \tau} \right|_T}.$$

CHAPITRE 3

Écoulements en transition de phase

3.1 Introduction	78
3.2 Système des équations d'Euler	79
3.2.1 Hyperbolicité	83
3.3 Lien entre $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$ et $(\tau, s) \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$	86
3.4 Quantités adimensionnées	88
3.5 Étude préliminaire	91
3.5.1 Équation d'une courbe isentrope	92
3.5.2 Étude de sa dérivée première et lien avec la vitesse du son	93
3.5.3 Étude de sa dérivée seconde et lien avec la dérivée fondamentale	95
3.6 Étude à la traversée des courbes de saturation	97
3.6.1 Vitesse du son	97
3.6.2 Isentropes	101
3.6.3 Dôme de saturation et point critique	103
3.6.4 Isothermes	106
3.7 Conclusion	107
Annexes	109
3.A Dérivée fondamentale et modèle de Van der Waals	109

Résumé

CE CHAPITRE porte sur la dynamique des transitions de phase via le système des équations d'Euler. Nous étudierons les propriétés mathématiques de ce système lorsqu'il est fermé par la loi d'état de changement de phase construite au chapitre précédent.

Nous verrons d'abord que la vitesse du son, malgré sa discontinuité le long de la courbe de saturation (cf. définition 2.1 à la page 33), est

toujours réelle et strictement positive, ce qui garantit que le système des équations d'Euler est strictement hyperbolique. Cette partie est issue de Allaire et al. (2).

Nous examinons ensuite les courbes isentropes (décroissance et convexité) dans le plan d'Amagat. Cette étude permettra de mettre en évidence certaines difficultés du problème de Riemann comme on verra au prochain chapitre.

Sans perte de généralité, l'ensemble des études menées dans ce chapitre est présenté dans un cadre unidimensionnel.

3.1. Introduction

On se place dans le cadre de la mécanique des milieux continus. Tout état de la matière est caractérisé par plusieurs variables macroscopiques, les principales étant la densité de masse ρ , la vitesse $\mathbf{u} \stackrel{\text{def}}{=} (u_x, u_y, u_z)$ et l'énergie interne molaire ε . Son évolution est décrite par les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Le système des équations aux dérivées partielles en trois dimensions d'espace s'écrit :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = \operatorname{div} \mathfrak{T}, \\ \partial_t \left(\rho \left(\frac{|\mathbf{u}|^2}{2} + \varepsilon \right) \right) + \operatorname{div} \left(\rho \left(\frac{|\mathbf{u}|^2}{2} + \varepsilon \right) \mathbf{u} + P \mathbf{u} \right) = \operatorname{div}(\mathfrak{T} \mathbf{u}) - \operatorname{div} \mathbf{q}, \end{cases}$$

où P est la pression, $\mathfrak{T} - P \operatorname{Id}$ le tenseur des contraintes et \mathbf{q} le flux de chaleur.

Si on néglige les termes du second membre ($\mathfrak{T} = 0$ et $\mathbf{q} = \mathbf{0}$), autrement dit si on néglige les effets de dissipation thermique et visqueuse, de tension superficielle et la gravité, on obtient le système des équations d'Euler sous forme conservative :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = 0 \\ \partial_t \left(\rho \left(\frac{|\mathbf{u}|^2}{2} + \varepsilon \right) \right) + \operatorname{div} \left(\rho \left(\frac{|\mathbf{u}|^2}{2} + \varepsilon \right) \mathbf{u} + P \mathbf{u} \right) = 0. \end{cases}$$

Pour fermer ce système une relation supplémentaire reliant la pression P aux variables thermodynamiques (ρ, ε) doit être connue. C'est l'équation d'état caractérisant le fluide, généralement donnée sous la forme d'une équation d'état complète $\mathbf{w} \mapsto s$ ou, plus souvent, incomplète $\mathbf{w} \mapsto P$. À noter que l'entropie s est toujours l'entropie physique.

Pour pouvoir étudier le problème de Riemann et ses pathologies, nous allons d'abord analyser le spectre de la matrice jacobienne associée au système des équations d'Euler et notamment étudier le signe de la vitesse du son c . Soulignons que la positivité stricte de la vitesse du son n'est pas triviale : d'abord la fonction $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ est concave (mais

pas strictement concave) et sa matrice hessienne n'est pas définie négative. En effet la concavité garantie que $c \geq 0$, mais on n'a pas *a priori* d'informations qui nous assurent que $c > 0$. Pire encore, pour certains systèmes (voir notamment Caro [21], Caro *et al.* [22; 23; 24]) la perte de la stricte concavité de l'entropie amène vraiment à une vitesse du son nulle : dans ces cas la stricte hyperbolicité est perdue car les valeurs propres du système sont réelles, mais la matrice jacobienne du flux n'est plus diagonalisable.

3.2. Système des équations d'Euler

Considérons le système des équations d'Euler muni de la loi d'état à l'équilibre thermodynamique $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ construite au théorème 2.9 à la page 50. Pour classifier ce système nous examinons au préalable la matrice hessienne de l'entropie $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ lorsque \mathbf{w} est un état de mélange à l'équilibre.

☆THÉORÈME 3.1 (PROPRIÉTÉS DE d^2s^{eq}):

Soit $\mathbf{w} \in \mathcal{C}$ un état de mélange à l'équilibre (défini à la proposition 2.7 à la page 47) et soit $\tau_{12} \stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{M}_1^*, \mathbf{M}_2^*)$ le segment qui lui est associé (le segment τ_{12} et les points \mathbf{M}_α^* étant définis au théorème 2.1 à la page 52).

Alors, sous l'hypothèse 2.5, pour tout point $\mathbf{M} \stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{w}, s^{\text{eq}}(\mathbf{w}))$ du segment τ_{12}

☞ la matrice hessienne vérifie

$$s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}} (\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) + s_{\tau\tau}^{\text{eq}} (\tau_1^* - \tau_2^*) = 0, \quad (3.1a)$$

$$s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} (\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) + s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}} (\tau_1^* - \tau_2^*) = 0, \quad (3.1b)$$

$$s_{\tau\tau}^{\text{eq}} s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} = (s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}})^2, \quad (3.1c)$$

$$s_{\tau\tau}^{\text{eq}} = \left(\frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*} \right)^2 s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}}, \quad (3.1d)$$

$$s_{\tau\tau}^{\text{eq}} < 0, \quad (3.2a)$$

$$s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} < 0, \quad (3.2b)$$

$$s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}} > 0; \quad (3.2c)$$

☞ la pression et la température vérifient

$$p^{\text{eq}} \neq - \frac{(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*)}{(\tau_1^* - \tau_2^*)}, \quad (3.3a)$$

$$T^{\text{eq}} \neq \frac{(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*)}{(s_1^* - s_2^*)}. \quad (3.3b)$$

◇

Ce théorème donne une caractérisation de la matrice hessienne de l'entropie à saturation s^{eq} et notamment le fait que la loi d'état à l'équilibre thermodynamique satisfait les inégalités (2.3) et (2.4b) mais pas l'inégalité (2.4a) à la page 29. Autrement dit

☞ d^2s^{eq} est une matrice définie négative dans les phases pures :

pour tout \mathbf{w} état monophasique on a $\mathbf{v}^T d^2s^{eq}(\mathbf{w})\mathbf{v} < 0 \quad \forall \mathbf{v} \neq 0$,

☞ d^2s^{eq} est une matrice semi-définie négative (mais non définie négative et non nulle) dans le mélange :

pour tout \mathbf{w} état de mélange on a
$$\begin{cases} \mathbf{v}^T d^2s^{eq}(\mathbf{w})\mathbf{v} \leq 0 \quad \forall \mathbf{v} \\ \exists! \mathbf{v}(\mathbf{w}) \neq 0 \text{ tq } (\mathbf{v}(\mathbf{w}))^T d^2s^{eq}(\mathbf{w}) \mathbf{v}(\mathbf{w}) = 0. \end{cases}$$

Les inégalités portant sur la pression et la température seront utilisées pour démontrer que la vitesse du son est toujours strictement positive.

PREUVE.

(3.1) Les sauts du volume, de l'énergie interne et de l'entropie molaires à travers la courbe de coexistence (hypothèse 2.5) impliquent que, pour tout point $(\mathbf{w}, s^{eq}(\mathbf{w}))$ de la zone de saturation définie à la page 39, on a

$$0 < y^* < 1, \quad \tau_1^* \neq \tau_2^*, \quad \varepsilon_1^* \neq \varepsilon_2^*, \quad s_1^* \neq s_2^*,$$

où, on le rappelle, $\tau_\alpha^*, \varepsilon_\alpha^*, y^*$ sont tels que $\mathbf{w} = y^* \mathbf{w}_1^* + (1 - y^*) \mathbf{w}_2^*$ et $s^{eq}(\mathbf{w}) = y^* s_1(\mathbf{w}_1^*) + (1 - y^*) s_2(\mathbf{w}_2^*)$.

(3.1a)-(3.1b) Le long du segment $r_{12}(\mathbf{w})$, la pression $P^{eq} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{s_\tau^{eq}}{s_\varepsilon^{eq}}$ et la température $T^{eq} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{s_\varepsilon^{eq}}$ sont constantes. Donc, si on calcule les dérivées directionnelles, on a

$$0 = d \left(\frac{P^{eq}}{T^{eq}} \right) \cdot (\mathbf{w}_1^* - \mathbf{w}_2^*) = s_{\tau\varepsilon}^{eq} (\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) + s_{\tau\tau}^{eq} (\tau_1^* - \tau_2^*)$$

et

$$0 = d \left(\frac{1}{T^{eq}} \right) \cdot (\mathbf{w}_1^* - \mathbf{w}_2^*) = s_{\varepsilon\varepsilon}^{eq} (\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) + s_{\tau\varepsilon}^{eq} (\tau_1^* - \tau_2^*).$$

On en déduit immédiatement que

$$(3.1c) \quad s_{\tau\tau}^{eq} s_{\varepsilon\varepsilon}^{eq} = (s_{\tau\varepsilon}^{eq})^2$$

et que

$$(3.1d) \quad \begin{cases} s_{\tau\tau}^{eq} = -s_{\tau\varepsilon}^{eq} \frac{(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*)}{(\tau_1^* - \tau_2^*)} \\ s_{\tau\varepsilon}^{eq} = -s_{\varepsilon\varepsilon}^{eq} \frac{(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*)}{(\tau_1^* - \tau_2^*)} \end{cases} \quad \text{d'où} \quad s_{\tau\tau}^{eq} = s_{\varepsilon\varepsilon}^{eq} \left(\frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*} \right)^2.$$

(3.2) On sait que, par construction, $s_{\tau\tau}^{eq} \leq 0$ et $s_{\varepsilon\varepsilon}^{eq} \leq 0$. Puisqu'on a prouvé les égalités (3.1), il suffit de démontrer que $s_{\tau\tau}^{eq}(\mathbf{w}) \neq 0$ pour tout état de mélange à l'équilibre \mathbf{w} .

Procédons *par l'absurde* :

soit $\bar{\mathbf{w}}$ un état de mélange à l'équilibre tel que $s_{\tau\tau}^{eq}(\bar{\mathbf{w}}) = 0$. Sous l'hypothèse 2.5, puisqu'on a les égalités (3.1b) et (3.1c), la matrice hessienne est nulle en $\bar{\mathbf{w}}$, c'est-à-dire $d^2s^{eq}(\bar{\mathbf{w}}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$.

Notons $(\bar{P}, \bar{T}, \bar{g}) \stackrel{\text{def}}{=} (P_\alpha, T_\alpha, g_\alpha)(\bar{\mathbf{w}})$ pour $\alpha = 1, 2$ (on sait que P , T et g sont constantes le long du segment τ_{12}).

Considérons ensuite une courbe de classe \mathcal{C}^2 sur la surface \mathcal{S} (le graphe de s^{eq}) paramétrée par

$$t \in [-1, 1] \mapsto (\mathbf{w}, \gamma \stackrel{\text{def}}{=} s^{\text{eq}}(\mathbf{w}))(t)$$

telle que $\mathbf{w}(0) = \bar{\mathbf{w}}$ et $\frac{d\mathbf{w}_\alpha^*}{dt} \neq 0$ (cf. figure ci-contre).

Pour ne pas alourdir les notations, dorénavant on indiquera

$$\begin{aligned} ds^{\text{eq}}(\mathbf{w}(t)) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{ds^{\text{eq}}}{d\mathbf{w}}, \\ d^2s^{\text{eq}}(\mathbf{w}(t)) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{d^2s^{\text{eq}}}{d\mathbf{w}^2}. \end{aligned}$$

On a

$$\begin{aligned} \gamma'(t) &= \frac{ds^{\text{eq}}}{dt} = ds^{\text{eq}}(\mathbf{w}(t)) \frac{d\mathbf{w}(t)}{dt}, \\ \gamma''(t) &= \frac{d^2s^{\text{eq}}}{dt^2} = ds^{\text{eq}}(\mathbf{w}(t)) \frac{d^2\mathbf{w}(t)}{dt^2} + \frac{d\mathbf{w}^\top}{dt} d^2s^{\text{eq}}(\mathbf{w}(t)) \frac{d\mathbf{w}(t)}{dt}. \end{aligned}$$

Donc, en $t = 0$, on a $\mathbf{w}(0) = \bar{\mathbf{w}}$, $d^2s^{\text{eq}}(\bar{\mathbf{w}}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ et

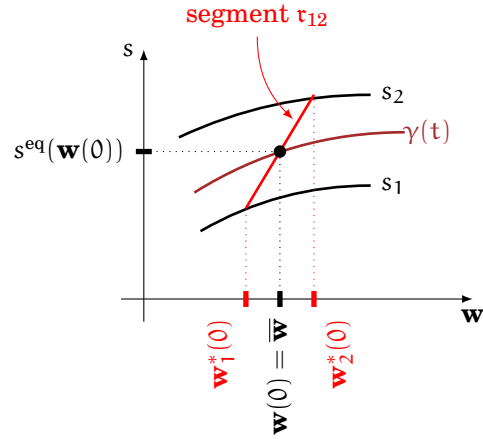
$$\gamma''(0) = ds^{\text{eq}}(\bar{\mathbf{w}}) \frac{d^2\mathbf{w}(0)}{dt^2}.$$

Il existe aussi quatre fonctions $t \mapsto y_\alpha^*$ et $t \mapsto \mathbf{w}_\alpha^*$ de classe \mathcal{C}^2 telles que

$$\begin{aligned} \mathbf{w}(t) &= \sum_{\alpha=1,2} y_\alpha^*(t) \mathbf{w}_\alpha^*(t), \\ \gamma(t) &= \sum_{\alpha=1,2} y_\alpha^*(t) s_\alpha^*(\mathbf{w}_\alpha^*(t)), \end{aligned}$$

où $y_1^* = y^*$ et $y_2^* = 1 - y^*$. De nouveau, pour ne pas alourdir les notations on indiquera

$$\begin{aligned} ds_\alpha(\mathbf{w}_\alpha(t)) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{ds_\alpha}{d\mathbf{w}_\alpha}, \\ d^2s_\alpha(\mathbf{w}_\alpha(t)) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{d^2s_\alpha}{d\mathbf{w}_\alpha^2}. \end{aligned}$$



On a

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{w}}{dt} &= \sum_{\alpha=1,2} \frac{dy_{\alpha}^*}{dt} \mathbf{w}_{\alpha}^* + y_{\alpha}^* \frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt}, \\ \frac{d^2\mathbf{w}}{dt^2} &= \sum_{\alpha=1,2} \left(\frac{d^2y_{\alpha}^*}{dt^2} \mathbf{w}_{\alpha}^* + 2 \frac{dy_{\alpha}^*}{dt} \frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} + y_{\alpha}^* \frac{d^2\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt^2} \right).\end{aligned}\quad (3.4)$$

Donc

$$\begin{aligned}\gamma'(t) &= \sum_{\alpha=1,2} \frac{dy_{\alpha}^*}{dt} s_{\alpha}^* + y_{\alpha}^* ds_{\alpha}^* \frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt}, \\ \gamma''(t) &= \sum_{\alpha=1,2} \left[\frac{d^2y_{\alpha}^*}{dt^2} s_{\alpha}^* + 2 \frac{dy_{\alpha}^*}{dt} ds_{\alpha}^* \frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} + \right. \\ &\quad \left. + y_{\alpha}^* ds_{\alpha}^* \frac{d^2\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt^2} + y_{\alpha}^* \left(\frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} \right)^T d^2s_{\alpha}^* \frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} \right],\end{aligned}$$

où $s_{\alpha}^* \stackrel{\text{déf}}{=} s_{\alpha}(\mathbf{w}_{\alpha}^*)$. Puisque $ds_{\alpha}(\mathbf{w}_{\alpha}^*(0)) = ds^{\text{eq}}(\mathbf{w}(0))$ (c'est-à-dire $P_{\alpha}(\mathbf{w}_{\alpha}^*(0)) = P(\mathbf{w}(0))$ et $T_{\alpha}(\mathbf{w}_{\alpha}^*(0)) = T(\mathbf{w}(0))$) on obtient

$$\sum_{\alpha=1,2} \left(2 \frac{dy_{\alpha}^*}{dt} ds_{\alpha}^* \frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} + y_{\alpha}^* ds_{\alpha}^* \frac{d^2\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt^2} \right) = ds^{\text{eq}} \sum_{\alpha=1,2} \left(2 \frac{dy_{\alpha}^*}{dt} \frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} + y_{\alpha}^* \frac{d^2\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt^2} \right).$$

De l'équation (3.4) on a alors

$$ds^{\text{eq}} \sum_{\alpha=1,2} \left(2 \frac{dy_{\alpha}^*}{dt} \frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} + y_{\alpha}^* \frac{d^2\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt^2} \right) = ds^{\text{eq}} \frac{d^2\mathbf{w}}{dt^2} - \sum_{\alpha=1,2} \frac{d^2y_{\alpha}^*}{dt^2} ds_{\alpha}^* \mathbf{w}_{\alpha}^*$$

d'où

$$\begin{aligned}\gamma''(0) &= ds^{\text{eq}}(\overline{\mathbf{w}}) \frac{d^2\mathbf{w}(0)}{dt^2} - \frac{d^2y^*}{dt^2} \sum_{\alpha=1,2} (-)^{\alpha+1} (s_{\alpha}^* - ds_{\alpha}^* \mathbf{w}_{\alpha}^*) + \\ &\quad + \sum_{\alpha=1,2} y_{\alpha}^* \left(\frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} \right)^T d^2s_{\alpha}^* \frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt}\end{aligned}$$

qui équivaut à

$$\gamma''(0) = ds^{\text{eq}}(\overline{\mathbf{w}}) \frac{d^2\mathbf{w}(0)}{dt^2} - \frac{d^2y^*}{dt^2} \left(\frac{g_1}{T_1} - \frac{g_2}{T_2} \right) + \sum_{\alpha=1,2} y_{\alpha}^* \left(\frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} \right)^T d^2s_{\alpha}^* \frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt},$$

car $s_{\alpha}^* - ds_{\alpha}^* \mathbf{w}_{\alpha}^* = s_{\alpha}^* - \frac{P_{\alpha}}{T_{\alpha}} \tau_{\alpha}^* - \frac{1}{T_{\alpha}} \varepsilon_{\alpha}^* = \frac{g_{\alpha}}{T_{\alpha}}$.

Puisque $\frac{g_{\alpha}}{T_{\alpha}} = \frac{\overline{g}}{T}$, elle se réécrit

$$\gamma''(0) = ds^{\text{eq}}(\overline{\mathbf{w}}) \frac{d^2\mathbf{w}(0)}{dt^2} + \sum_{\alpha=1,2} y_{\alpha}^* \left(\frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} \right)^T d^2s_{\alpha}^* \frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt}.$$

En résumant on a

$$ds^{\text{eq}}(\bar{\mathbf{w}}) \frac{d^2 \mathbf{w}(0)}{dt^2} = \gamma''(0) = ds^{\text{eq}}(\bar{\mathbf{w}}) \frac{d^2 \mathbf{w}(0)}{dt^2} + \sum_{\alpha=1,2} y_{\alpha}^* \left(\frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} \right)^{\top} d^2 s_{\alpha}^* \frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt}.$$

Par conséquent on obtient

$$0 = \sum_{\alpha=1,2} y_{\alpha}^* \left(\frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} \right)^{\top} d^2 s_{\alpha}^* \left(\frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} \right),$$

Sachant que $\frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} \neq \mathbf{0}$, on arrive à une contradiction puisque les matrices hessiennes des entropies monophasiques s_{α} sont définies strictement négatives.

On a donc obtenu que $s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}} \neq 0$. Or, puisque $\text{sgn}(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) = \text{sgn}(\tau_1^* - \tau_2^*)$, grâce à la relation (3.1b) on obtient l'inégalité

$$s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}} = -s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} \frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*} > 0.$$

(3.3) L'inégalité (3.3a) portant sur la pression P^{eq} est triviale puisque $\text{sgn}(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) = \text{sgn}(\tau_1^* - \tau_2^*)$. L'inégalité (3.3b) portant sur la température T^{eq} découle de la définition du potentiel de Gibbs car le long du segment τ_{12} on a

$$0 = g_1 - g_2 = (\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) + P^{\text{eq}}(\tau_1^* - \tau_2^*) - T^{\text{eq}}(s_1^* - s_2^*),$$

ce qui conclut la preuve. \blacklozenge

3.2.1. Hyperbolicité

Rappelons d'abord quelques définitions concernant l'hyperbolicité en 1D (voir par exemple Evans [34]). Considérons un système d'équations aux dérivées partielles du premier ordre écrit sous forme non conservative

$$\partial_t \mathbf{V} + \mathbb{A}(\mathbf{V}) \partial_x \mathbf{V} = \mathbf{0}, \quad \mathbb{A} \in \mathcal{M}^{n \times n}$$

et soient $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ les valeurs propres de la matrice jacobienne du flux \mathbb{A} . Si ces valeurs propres sont réelles, on peut classer le type d'hyperbolicité du système.

Indiquons avec α_i la multiplicité algébrique de la i -ième valeur propre et avec g_i sa multiplicité géométrique (c'est-à-dire la dimension de l'espace propre associé), alors

- ☛ si pour tout i on a $g_i = \alpha_i = 1$ alors non seulement la matrice jacobienne \mathbb{A} est diagonalisable (c'est-à-dire qu'elle admet un ensemble complet de valeurs et de vecteurs propres) mais de plus toutes les valeurs propres sont distinctes : on dit que le système est strictement hyperbolique ;
- ☛ si pour tout i on a $g_i = \alpha_i > 1$ alors la matrice jacobienne \mathbb{A} est diagonalisable mais il y a des valeurs propres coïncidentes : on dit que le système est hyperbolique

non strictement ;

☞ s'il existe un indice i tel que $g_i < a_i$ alors la matrice jacobienne \mathbb{A} n'est pas diagonalisable : on dit que le système est faiblement hyperbolique.

On peut finalement énoncer le théorème suivant qui établit le caractère strictement hyperbolique du système des équations d'Euler.

☆ **THÉORÈME 3.2:**

Considérons la fonction entropie à saturation $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ définie par le théorème 3.1 (ou par la proposition 2.7) qui décrit le comportement du fluide en phase pure et pendant le changement de phase. Considérons le système des équations d'Euler compressible non visqueux équipé de cette loi d'état et écrivons-le, pour des solutions régulières, sous forme non conservative (sans perte de généralité on se restreint au cas d'une dimension d'espace) :

$$\partial_t \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ \varepsilon \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} u & \rho & 0 \\ \frac{1}{\rho} \frac{\partial p^{\text{eq}}}{\partial \rho} \Big|_{\varepsilon} & u & \frac{1}{\rho} \frac{\partial p^{\text{eq}}}{\partial \varepsilon} \Big|_{\rho} \\ 0 & \frac{p^{\text{eq}}}{\rho} & u \end{pmatrix} \partial_x \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ \varepsilon \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

avec $\rho = \frac{1}{\tau}$, $p^{\text{eq}} = \frac{s_{\tau}^{\text{eq}}}{s_{\varepsilon}^{\text{eq}}}.$

Alors la vitesse du son c , dont le carré s'écrit

$$c^2 \stackrel{\text{def}}{=} \tau^2 \left(p^{\text{eq}} \frac{\partial p^{\text{eq}}}{\partial \varepsilon} \Big|_{\tau} - \frac{\partial p^{\text{eq}}}{\partial \tau} \Big|_{\varepsilon} \right),$$

est réelle et strictement positive et le système (3.5) est strictement hyperbolique dans le cône $\mathcal{C} = \{\tau > 0, \varepsilon > 0\}$. \diamond

PREUVE.

La matrice jacobienne du flux a les trois valeurs propres

$$\lambda_1 \stackrel{\text{def}}{=} u - c, \quad \lambda_2 \stackrel{\text{def}}{=} u, \quad \lambda_3 \stackrel{\text{def}}{=} u + c$$

et les trois vecteurs propres (à droite) associés

$$\mathbf{r}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \rho^2 \\ -c\rho \\ p^{\text{eq}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_2 \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \partial p^{\text{eq}} / \partial \varepsilon \\ 0 \\ -\partial p^{\text{eq}} / \partial \rho \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_3 \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \rho^2 \\ c\rho \\ p^{\text{eq}} \end{pmatrix}.$$

Si $c^2 < 0$ on a deux valeurs propres complexes conjuguées (λ_1 et λ_3) et le système est donc non hyperbolique. Si $c^2 = 0$ on a une valeur propre de multiplicité algébrique 3 ($\lambda_{1,2,3} = u$) et de multiplicité géométrique 1 (car $c = 0$ implique $p^{\text{eq}} = -\rho^2 \frac{\partial p / \partial \rho}{\partial p / \partial \varepsilon}$ et donc $\mathbf{r}_2 / \rho^2 = \mathbf{r}_{1,3}$) : le système est faiblement hyperbolique. Enfin si $c \neq 0$ alors les trois valeurs propres sont distinctes et les trois vecteurs propres libres.

Pour prouver le théorème il est donc nécessaire et suffisant de vérifier que $c^2 > 0$.

Comme

$$p^{eq} = \frac{s_{\tau}^{eq}}{s_{\varepsilon}^{eq}},$$

le carré de la vitesse du son peut être réécrit sous la forme

$$c^2 = -\tau^2 T^{eq} \begin{bmatrix} p^{eq}, & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_{\varepsilon\varepsilon}^{eq} & s_{\tau\varepsilon}^{eq} \\ s_{\varepsilon\tau}^{eq} & s_{\tau\tau}^{eq} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p^{eq} \\ -1 \end{bmatrix}.$$

On voit que

$$\text{sgn}(c^2) = -\text{sgn} \left(\begin{bmatrix} p^{eq}, & -1 \end{bmatrix} d^2 s^{eq} \begin{bmatrix} p^{eq} \\ -1 \end{bmatrix} \right).$$

Puisque la matrice hessienne $d^2 s^{eq}$ est définie négative dans les états purs (i.e. monophasiques) mais qu'elle ne l'est pas dans les états de mélange à l'équilibre, nous allons distinguer ces cas dans la suite de cette preuve.

États «Purs» ($y \in \{0, 1\}$) :

si \mathbf{w} est un état monophasique pur alors l'entropie $\mathbf{w} \mapsto s^{eq}$ satisfait l'inégalité (2.4a) (car $s^{eq}(\mathbf{w}) \equiv s_{\alpha}(\mathbf{w})$ avec $\alpha = 1$ si $y = 1$ et $\alpha = 2$ si $y = 0$) donc

$$c^2 > -\frac{\tau^2 T}{s_{\tau\tau}^{eq}} (p^{eq} s_{\varepsilon\tau}^{eq} - s_{\tau\varepsilon}^{eq})^2 \geq 0.$$

États «de Mélange à l'équilibre» ($0 < y < 1$) :

au théorème 3.1 à la page 79 on a démontré que si \mathbf{w} est un état de mélange à l'équilibre, l'entropie $\mathbf{w} \mapsto s^{eq}$ ne satisfait pas l'inégalité (2.4a) (elle dévient une égalité). Toutefois le carré de la vitesse du son s'écrit

$$c^2 = -\tau^2 T^{eq} ((p^{eq})^2 s_{\varepsilon\varepsilon}^{eq} - 2p^{eq} s_{\tau\varepsilon}^{eq} + s_{\tau\tau}^{eq})$$

en utilisant la relation (3.1c) il devient

$$= -\tau^2 T^{eq} \frac{1}{s_{\tau\tau}^{eq}} (p^{eq} s_{\varepsilon\tau}^{eq} - s_{\tau\varepsilon}^{eq})^2$$

grâce à la relation (3.1a) on obtient

$$= -\tau^2 T^{eq} \frac{(s_{\tau\varepsilon}^{eq})^2}{s_{\tau\tau}^{eq}} \left(p^{eq} + \frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*} \right)^2$$

qui est strictement positif à cause des inégalités (3.2) et (3.3a).

En conclusion c^2 est strictement positif, donc c est réelle et strictement positive pour tout état thermodynamique $\mathbf{w} \in \mathcal{C}$ et le système (3.5) est strictement hyperbolique, ce qui achève la démonstration. \blacklozenge

Cette propriété du système des équations d'Euler est remarquable surtout vis-à-vis du caractère faiblement hyperbolique du même système sans énergie. En effet, si l'on considère le p-système¹ avec une loi de pression construite de façon analogue à ce

¹p-système : $\begin{cases} \partial_t \rho + \text{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) + \text{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = 0, \end{cases} \quad \text{avec } P : \tau \mapsto P(\tau).$

qu'on a présenté ci-dessus (pour plus de détails on pourra consulter la thèse de Caro [21, chap. 5] ou les articles de Caro *et al.* [22; 23; 24]), la matrice jacobienne du flux a des valeurs propres réelles mais elle n'est pas diagonalisable.

Du théorème 3.1 on déduit les deux corollaires suivants :

⇒ **COROLLAIRE 3.1:**

Le système MTT-equilibrium défini dans la thèse de Caro [21, chap. 6], le système des équations d'Euler muni de la loi d'état définie dans les articles de Barberon et Helluy [10], Helluy [46], Helluy et Seguin [48] ou de la loi définie dans les thèses de Jaouen [58] et Voß [96] ou encore de la loi définie dans les articles de Le Métayer et al. [67], Petitpas et al. [86] sont tous strictement hyperboliques. ◇

⇒ **COROLLAIRE 3.2 (RÉGULARITÉ):**

Si l'entropie à saturation $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ est de classe \mathcal{C}^1 et de classe \mathcal{C}^2 par morceaux dans le sens que la zone de mélange (définie par le système (MZ) de la proposition 2.13 à la page 39) est une variété de classe \mathcal{C}^2 avec un bord qui est une boucle simple fermée de classe \mathcal{C}^1 , alors

- 1) *les fonctions $\mathbf{w} \mapsto (p^{\text{eq}}, T^{\text{eq}})(\mathbf{w})$ (et donc la fonction flux dans le système des équations d'Euler) sont continues et de classe \mathcal{C}^1 par morceaux : leurs dérivées sont discontinues lorsque le fluide change d'un état dans une phase pure $y \in \{0, 1\}$ à un état diphasique $y \in]0, 1[$;*
- 2) *la vitesse du son $\mathbf{w} \mapsto c$ est continue par morceaux : elle est discontinue le long de la courbe de saturation.* ◇

3.3. Lien entre $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$ et $(\tau, s) \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$

Pour étudier les courbes isentropes de la loi de changement de phase, il est plus simple de travailler en variables (τ, u, s) . Avant de passer à leur étude on va donc reformuler les théorèmes précédents pour ce jeu de variables.

Comme pour les lois d'état qui décrivent le comportement d'une phase pure, pour la loi d'état à saturation l'application qui permet de passer de la fonction $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$ à la fonction $(\tau, s) \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$ est un difféomorphisme local car $(s_\varepsilon^{\text{eq}}(\mathbf{w}))^{-1} = T = \varepsilon_s^{\text{eq}}(\tau, s)$ et $T > 0$ pour tout état (phase pure ou mélange à l'équilibre). C'est pourquoi les résultats précédents portant sur la loi $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$ peuvent être traduits pour la loi $(\tau, s) \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$. Notamment les théorèmes formulés précédemment portant sur la fonction $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$ peuvent être facilement transposés pour la fonction $(\tau, s) \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$. Les uniques théorèmes qui nécessitent un peu plus d'attention sont les théorèmes 2.1 à la page 52 et 3.1 à la page 79 qui s'écrivent comme suit (on omet la démonstration).

☞ **DÉFINITION 3.1.** *Pour tout état $(\mathbf{w} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, \varepsilon), s^{\text{eq}}(\mathbf{w}))$ on définit un état lui associé comme*

$$(\widehat{\mathbf{w}} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, s), \varepsilon^{\text{eq}}(\widehat{\mathbf{w}})).$$

Étant donné que la fonction $(\tau, \varepsilon) \mapsto (\tau, s)$ est un difféomorphisme local, alors pour tout \mathbf{w} il existe un et un seul état $\hat{\mathbf{w}}$ lui associé. Avec un abus de langage on appellera encore «état de mélange à l'équilibre» tout état $\hat{\mathbf{w}}$ associé à un état \mathbf{w} de mélange à l'équilibre (défini à la proposition 2.7 à la page 47).

☆**THÉORÈME 3.3 (PROPRIÉTÉS DE $\mathbf{d}^2_{\varepsilon^{\text{eq}}}$):**

① Soient \mathcal{E}_α les graphes des énergies monophasiques

$$\hat{\mathbf{w}}_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} (\tau_\alpha, s_\alpha) \mapsto \varepsilon_\alpha (> 0)$$

dans l'espace tridimensionnel (τ, s, ε) et soit

$$\hat{\mathbf{w}} \in \hat{\mathcal{C}} \stackrel{\text{def}}{=} \{\tau > 0, s \in \mathbb{R}\}$$

un état de mélange à l'équilibre. Alors il existe un unique couple de points

$$\hat{\mathbf{M}}_1^* \stackrel{\text{def}}{=} (\hat{\mathbf{w}}_1^*, \varepsilon_1^* \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_1(\hat{\mathbf{w}}_1^*)) \in \mathcal{E}_1 \quad \text{et} \quad \hat{\mathbf{M}}_2^* \stackrel{\text{def}}{=} (\hat{\mathbf{w}}_2^*, \varepsilon_2^* \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_2(\hat{\mathbf{w}}_2^*)) \in \mathcal{E}_2$$

tel que le point $\hat{\mathbf{M}} \stackrel{\text{def}}{=} (\hat{\mathbf{w}}, \varepsilon^{\text{eq}}(\hat{\mathbf{w}}))$ appartient au segment

$$\hat{\tau}_{12} \stackrel{\text{def}}{=} (\hat{\mathbf{M}}_1^*, \hat{\mathbf{M}}_2^*) = \{y\hat{\mathbf{M}}_1^* + (1-y)\hat{\mathbf{M}}_2^* \mid y \in [0, 1]\}.$$

② Soit $\hat{\mathbf{w}} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, s) \in \hat{\mathcal{C}}$ un état de mélange à l'équilibre et soit $\hat{\tau}_{12} \stackrel{\text{def}}{=} (\hat{\mathbf{M}}_1^*, \hat{\mathbf{M}}_2^*)$ le segment qui lui est associé. Alors, sous l'hypothèse 2.5, pour tout point $\hat{\mathbf{M}} \stackrel{\text{def}}{=} (\hat{\mathbf{w}}, \varepsilon^{\text{eq}}(\hat{\mathbf{w}}))$ du segment $\hat{\tau}_{12}$ on a

$$\varepsilon_{\tau s}^{\text{eq}}(s_1^* - s_2^*) + \varepsilon_{\tau \tau}^{\text{eq}}(\tau_1^* - \tau_2^*) = 0, \quad (3.6a)$$

$$\varepsilon_{ss}^{\text{eq}}(s_1^* - s_2^*) + \varepsilon_{\tau s}^{\text{eq}}(\tau_1^* - \tau_2^*) = 0, \quad (3.6b)$$

$$\varepsilon_{\tau \tau}^{\text{eq}} \varepsilon_{ss}^{\text{eq}} = (\varepsilon_{\tau s}^{\text{eq}})^2, \quad (3.6c)$$

$$\varepsilon_{\tau \tau}^{\text{eq}} = \left(\frac{s_1^* - s_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*} \right)^2 \varepsilon_{ss}^{\text{eq}}, \quad (3.6d)$$

$$\varepsilon_{\tau \tau}^{\text{eq}} > 0, \quad (3.7a)$$

$$\varepsilon_{ss}^{\text{eq}} > 0, \quad (3.7b)$$

$$\varepsilon_{\tau s}^{\text{eq}} < 0; \quad (3.7c)$$

$$p^{\text{eq}} \neq - \frac{(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*)}{(\tau_1^* - \tau_2^*)}, \quad (3.8a)$$

$$T^{\text{eq}} \neq \frac{(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*)}{(s_1^* - s_2^*)}. \quad (3.8b)$$

◇

À propos du signe des éléments des deux matrices hessiennes associées à s^{eq} et à ε^{eq} , grâce aux inégalités prouvées au théorème 3.1 à la page 79 et à son analogue 3.3, on voit que

☞ si \mathbf{w} est un état monophasique, alors

$$\begin{aligned} s_{\tau\tau}^{\text{eq}} &< 0, & \varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}} &> 0, \\ s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} &< 0, & \varepsilon_{ss}^{\text{eq}} &> 0, \\ s_{\tau\tau}^{\text{eq}} s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} &> (s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}})^2, & \varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}} \varepsilon_{ss}^{\text{eq}} &> (\varepsilon_{s\tau}^{\text{eq}})^2, \end{aligned}$$

☞ si \mathbf{w} est un état de mélange à l'équilibre, alors

$$\begin{aligned} s_{\tau\tau}^{\text{eq}} &< 0, & \varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}} &> 0, \\ s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} &< 0, & \varepsilon_{ss}^{\text{eq}} &> 0, \\ s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}} &> 0, & \varepsilon_{\tau s}^{\text{eq}} &< 0, \\ s_{\tau\tau}^{\text{eq}} s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} &= (s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}})^2, & \varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}} \varepsilon_{ss}^{\text{eq}} &= (\varepsilon_{s\tau}^{\text{eq}})^2. \end{aligned}$$

3.4. Quantités adimensionnées

Nous aurons besoin de certains paramètres adimensionnels pour caractériser le fluide. Ces quantités sont des combinaisons des dérivées premières et secondes de la loi $\hat{\mathbf{w}} \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$ (ou de la loi $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$).

☞ **DÉFINITION 3.2 (COEFFICIENTS ADIMENSIONNELS).** *Considérons la loi d'état de changement de phase sous la forme $\hat{\mathbf{w}} \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$. On définit alors*

1. *l'exposant adiabatique (aussi appelé coefficient polytropique)*

$$\gamma(\hat{\mathbf{w}}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\tau}{p^{\text{eq}}(\hat{\mathbf{w}})} \varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}} \quad \left(= - \frac{\tau}{p^{\text{eq}}(\hat{\mathbf{w}})} \frac{\partial p^{\text{eq}}}{\partial \tau} \Big|_s \right),$$

2. *le coefficient de Grüneisen*

$$\Gamma(\hat{\mathbf{w}}) \stackrel{\text{def}}{=} - \frac{\tau}{T^{\text{eq}}(\hat{\mathbf{w}})} \varepsilon_{\tau s}^{\text{eq}},$$

3. *la chaleur spécifique adimensionnée²*

$$g(\hat{\mathbf{w}}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\tau p^{\text{eq}}(\hat{\mathbf{w}})}{(T^{\text{eq}}(\hat{\mathbf{w}}))^2} \varepsilon_{ss}^{\text{eq}} \quad \left(= \frac{\tau p^{\text{eq}}(\hat{\mathbf{w}})}{c_v(\hat{\mathbf{w}}) T^{\text{eq}}(\hat{\mathbf{w}})} \right),$$

c_v étant la chaleur molaire à volume constant définie comme $\frac{\partial \varepsilon^{\text{eq}}(\tau, T)}{\partial T} \Big|_{\tau}$.

On voit donc que la vitesse du son est liée à l'exposant adiabatique par la relation

$$c^2 = \gamma P \tau. \quad (3.9)$$

²Cette quantité est parfois notée g , mais nous réservons la lettre g pour le potentiel de Gibbs.

En fonction de l'entropie $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ ces quantités s'écrivent :

$$\begin{aligned}\gamma(\mathbf{w}) &= -\frac{T^{\text{eq}}(\mathbf{w})}{P^{\text{eq}}(\mathbf{w})} \tau((P^{\text{eq}}(\mathbf{w}))^2 s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} - 2P^{\text{eq}}(\mathbf{w}) s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}} + s_{\tau\tau}^{\text{eq}}), \\ \Gamma(\mathbf{w}) &= -\tau T^{\text{eq}}(\mathbf{w}) (P^{\text{eq}}(\mathbf{w}) s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} - s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}}), \quad \left(= \tau \frac{\partial P^{\text{eq}}}{\partial \varepsilon} \Big|_{\tau} \right) \\ g(\mathbf{w}) &= -P^{\text{eq}}(\mathbf{w}) T^{\text{eq}}(\mathbf{w}) \tau s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}}.\end{aligned}$$

Si on indique avec un $_m$ les quantités évaluées dans la zone de mélange des deux phases, celles non indicées se rapportant aux variables évaluées dans une des phases pures, alors grâce au théorème 3.3 à la page 87 on peut affirmer que

☛ si \mathbf{w} est un état monophasique

$$\gamma > 0, \quad g > 0, \quad g\gamma - \Gamma^2 > 0; \quad (3.10)$$

☛ si \mathbf{w} est un état de mélange à l'équilibre

$$\gamma_m > 0, \quad \Gamma_m > 0, \quad g_m > 0, \quad g_m \gamma_m - \Gamma_m^2 = 0. \quad (3.11)$$

Remarquons que Γ est signé pour les états de mélange à l'équilibre alors qu'il ne l'est pas pour les états monophasiques. De plus, pour les états de mélange à l'équilibre on peut énoncer le résultat suivant.

➡ **PROPOSITION 3.1:**

Si \mathbf{w} est un état de mélange à l'équilibre alors $\gamma_m > \Gamma_m > 0$. ◇

PREUVE.

On sait déjà que $\Gamma_m > 0$ et $\gamma_m > 0$. Puisqu'à saturation $s_{\tau\tau}^{\text{eq}} < 0$ et $s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}} > 0$, on a $s_{\tau\tau}^{\text{eq}} - P s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}} > 0$ qui donne $T \varepsilon_{\tau\tau} + P \varepsilon_{\tau s} > 0$ et donc $\gamma_m > \Gamma_m > 0$. ◆

Ce résultat sera utilisé pour l'étude des solutions du problème de Riemann et on verra que lorsque cette inégalité est aussi vérifiée pour les états monophasiques alors on pourra utiliser le critère entropique de Liu pour résoudre de manière unique le problème de Riemann.

Une hypothèse assez utile pour éviter des comportements non classiques est de demander que Γ soit positif pour les lois d'état de chaque phase (voir par exemple Goldewski et Raviart [41, p. 44], Kulikovskii *et al.* [62, p. 149] ou encore Benzoni-Gavage et Serre [14, pag. 387]). Bien qu'il existe des contre-exemples, cette condition est satisfaite par la plupart des fluides.³

☛ **HYPOTHÈSE 3.1.** Soit (τ, s) un état monophasique et considérons une loi d'état de la forme $(\tau, s) \mapsto \varepsilon$. On suppose $\varepsilon_{\tau s} < 0$. Autrement dit :

$$P s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} < s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}}, \quad \varepsilon_{\tau s}^{\text{eq}} < 0, \quad \Gamma > 0.$$

³On trouve $\Gamma < 0$ pour l'eau entre 0 °C et 4 °C, la glace à basses températures (1 bar et 20 K) ou la glace fondante et plus généralement pour tout corps ayant un coefficient de dilatation thermique négatif ou nul (par exemple le diamant ou l'acier «invar») mais ces cas ne rentrent pas dans le cadre de notre étude.

L'intérêt essentiel de cette hypothèse est d'exclure les intersections de courbes isentropes dans le plan (τ, P) . De plus, elle est nécessaire pour que la relation $(P, \tau) \leftrightarrow (s, \tau)$ soit une bijection. En effet cette relation n'est plus bijective à partir du moment où le coefficient de Grüneisen change de signe (le jacobien du changement de variables étant égal à $\frac{1}{\tau} \Gamma$).

Comme on a observé plus haut, cette hypothèse est automatiquement vérifiée pour les états de mélange à l'équilibre (cf. relation (3.11)).

Avant de passer à l'étude de la loi d'état globale on introduit une dernière grandeur adimensionnée associée à la concavité des courbes isentropes.

DEFINITION 3.3 (DÉRIVÉE FONDAMENTALE). *Considérons la loi d'état de changement de phase sous la forme $\widehat{\mathbf{w}} \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$. On définit la dérivée fondamentale comme la quantité*

$$\mathfrak{G}(\widehat{\mathbf{w}}) \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\tau}{2} \frac{\varepsilon_{\tau\tau\tau}^{\text{eq}}}{\varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}}} = -\frac{\tau}{2} \frac{\frac{\partial^2 P^{\text{eq}}}{\partial \tau^2} \Big|_s}{\frac{\partial P^{\text{eq}}}{\partial \tau} \Big|_s} \quad \left(= \frac{\tau^2}{2\gamma P^{\text{eq}}} \frac{\partial^2 P^{\text{eq}}}{\partial \tau^2} \Big|_s \right).$$

La dérivée fondamentale, introduite sous cette forme adimensionnée par Thompson [92] (et dénotée dans cet article par Γ), est une mesure de la convexité des courbes isentropes $(\tau, s) \mapsto P|_s$ dans le plan (τ, P) . La convexité de ces courbes est en effet cruciale pour l'étude de l'unicité des solutions du problème de Riemann associé au système (3.5).

Observons que $\text{sgn}(\mathfrak{G}) = \text{sgn}(\varepsilon_{\tau\tau\tau}^{\text{eq}})$ pour tout état (phase pure ou mélange à l'équilibre). De la même manière que pour le coefficient de Grüneisen, on étudie séparément les états monophasiques des états de mélange à l'équilibre.

États monophasiques Pour la plupart des fluides purs la dérivée fondamentale \mathfrak{G} est positive.⁴ Ceci implique que les courbes isentropes $(\tau, s) \mapsto P$ sont strictement convexes dans le plan (τ, P) et sert pour montrer que certaines champs sont vraiment non linéaires (comme on verra lorsque on étudiera le problème de Riemann) ce qui garantit l'existence et l'unicité de solutions autosimilaires (pourvu d'accepter la formation du vide). C'est pour cela qu'il est classique d'ajouter l'hypothèse suivante (voir par exemple Godlewski et Raviart [41, p. 44] ou Kulikovskii *et al.* [62, p. 149]) :

HYPOTHÈSE 3.2. *Soit $\widehat{\mathbf{w}} = (\tau, s)$ un état monophasique et considérons une loi d'état de la forme $\widehat{\mathbf{w}} \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$. On suppose que $\varepsilon_{\tau\tau\tau}^{\text{eq}} < 0$ et donc que $\mathfrak{G} > 0$.*

⁴Quelques rares matériaux, souvent à coefficient de dilatation thermique négatif (comme pour le coefficient de Grüneisen Γ), peuvent y faire exception : silice fondue, diamant, acier invar, ZrW₂O₈... On peut aussi rencontrer ce comportement au voisinage du point critique pour tous les matériaux respectant l'équation d'état de Van der Waals dans la phase vapeur (voir l'étude de page 57). Les fluides pour lesquels la dérivée fondamentale \mathfrak{G} est négative, étudiés d'abord théoriquement par Bethe [15], Thompson [92], puis identifiés expérimentalement par Lambrakis et Thompson [63], sont qualifiés de «fluides BTZ» ou «fluides rétrogrades» (voir par exemple Henderson [49, p. 18]). Pour une étude des lois d'état de ces fluides et des répercussions sur la résolution du problème de Riemann on pourra consulter notamment Menikoff et Plohr [80], Müller et Voß [81], Voß [96].

États de mélange à l'équilibre Jusqu'à maintenant on a toujours pu déduire les propriétés du mélange à l'équilibre à partir des hypothèses posées sur les lois d'état des deux phases pures. Or, pour ce qui est de la dérivée fondamentale, ceci n'est plus possible : en toute généralité on ne peut pas signer la dérivée fondamentale dans le mélange à l'équilibre. Toutefois, même si ce mélange est pour nous un fluide fictif (et donc non physique), la construction qu'on a effectuée est équivalente à la construction de Maxwell. Pour cette construction de nombreux auteurs (parmi lesquels Bethe [15], Duvall et Graham [33, p. 529], Henderson [49, p. 17], Voß [96, p. 64]) affirment que $\mathfrak{G}_m > 0$. De plus, lorsque les phases liquide et vapeur sont décrites par deux lois d'état de type gaz parfait polytropique, il est possible de vérifier algébriquement que $\mathfrak{G}_m > 0$ (comme on verra au chapitre 5) et lorsque les deux phases sont décrites par deux lois d'état de type *stiffened gas*, il est possible de le vérifier numériquement sur des exemples (comme on verra au chapitre 6). Donc dorénavant en plus de l'hypothèse 3.2 à la page précédente on ajoutera l'hypothèse suivante :

☞ **HYPOTHÈSE 3.3.** Soit $\widehat{\mathbf{w}} = (\tau, s)$ un état de mélange à l'équilibre et considérons la loi d'état $(\tau, s) \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$. On suppose $\varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}} < 0$ qui équivaut à $\mathfrak{G}_m > 0$.

Les hypothèses 3.2 et 3.3 postulent donc que \mathfrak{G} est positive pour tout état, phase pure ou mélange à l'équilibre. Il est toutefois évident que \mathfrak{G} n'est pas définie à travers les courbes de saturation car $\varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}}$ est discontinu.

3.5. Étude préliminaire de la loi de changement de phase

Dans cette section on étudie la loi d'état de changement de phase construite au chapitre précédent. On s'intéresse surtout à la forme des courbes isentropes, c'est-à-dire aux fonctions $\tau \mapsto P$ à entropie s constante. Pour cela on commence à étudier cette loi séparément dans chacune des trois zones (états monophasiques et états de mélange à l'équilibre). À la prochaine section on verra comment chaque branche se relie aux autres le long des courbes de saturation.

On a vu au chapitre 2 que la loi d'état de changement de phase peut être paramétrée par la température et n'importe quelle autre variable thermodynamique à l'exception de la pression. Dans l'étude qui suit on a choisit de transformer toutes les fonctions de (τ, s) en fonctions de (τ, T) .

Soit $(\tau, s) \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$ la loi de changement de phase. On veut étudier les courbes isentropes dans le plan (τ, P) décrites par la fonction

$$\tau \mapsto P^{\text{eq}} \stackrel{\text{def}}{=} - \left. \frac{\partial \varepsilon^{\text{eq}}}{\partial \tau} \right|_s.$$

Étant donnée la construction de la loi de changement de phase, qui se base sur la fonction $T \mapsto P^{\text{sat}}$ définissant la courbe de coexistence, il est évident que pour étudier ces

courbes il est plus simple d'exprimer les dérivées adiabatiques en termes des dérivées isothermes. Rappelons alors cette relation : pour toute fonction $\star(\tau, T(\tau, s))$ on a

$$\left. \frac{\partial \star}{\partial \tau} \right|_s = \left. \frac{\partial \star}{\partial \tau} \right|_T - \frac{\left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_T}{\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_\tau} \left. \frac{\partial \star}{\partial T} \right|_\tau. \quad (3.12)$$

3.5.1. Équation d'une courbe isentrope

En utilisant la relation (3.12) on obtient

$$-\left. \frac{\partial \varepsilon^{\text{eq}}}{\partial \tau} \right|_s = \frac{\left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_T}{\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_\tau} \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right|_\tau - \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} \right|_T.$$

Considérons séparément les trois zones : deux zones monophasiques et une zone de mélange à l'équilibre.

☞ États monophasiques

Si (τ, s) est un état monophasique, alors $(\tau, s) = (\tau_\alpha, s_\alpha)$ (α étant liq ou vap) et la loi de changement de phase coïncide avec la loi d'état qui décrit la phase pure $\varepsilon^{\text{eq}}(\tau, s) = \varepsilon_\alpha(\tau_\alpha, s_\alpha)$. Il n'est donc pas nécessaire de passer aux dérivées isothermes. Néanmoins, par souci d'homogénéité avec ce qui suit, on réécrit l'équation en variables (τ, T) et on obtient :

$$-\left. \frac{\partial \varepsilon^{\text{eq}}}{\partial \tau} \right|_s = \frac{\left. \frac{\partial s_\alpha}{\partial \tau} \right|_T}{\left. \frac{\partial s_\alpha}{\partial T} \right|_\tau} \left. \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial T} \right|_\tau - \left. \frac{\partial \varepsilon_\alpha}{\partial \tau} \right|_T,$$

avec

$$\left. \frac{\partial s_\alpha}{\partial \tau} \right|_T = \left. \frac{\partial P_\alpha}{\partial T} \right|_\tau \quad \text{et} \quad \left. \frac{\partial s_\alpha}{\partial T} \right|_\tau = \frac{c_{v,\alpha}}{T}.$$

☞ États de mélange à l'équilibre

Si (τ, s) est un état de mélange à l'équilibre alors, en passant aux variables (τ, T) , on a

$$\begin{aligned} \varepsilon(\tau, T) &= y(\tau, T) \varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) + (1 - y(\tau, T)) \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T), \\ s(\tau, T) &= y(\tau, T) s_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) + (1 - y(\tau, T)) s_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T), \end{aligned}$$

avec $y(\tau, T) = \frac{\tau - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}$ et ayant noté⁵

$$\tau_\alpha^{\text{sat}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \tau_\alpha(T, P^{\text{sat}}(T)), \quad \varepsilon_\alpha^{\text{sat}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_\alpha(T, P^{\text{sat}}(T)), \quad s_\alpha^{\text{sat}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} s_\alpha(T, P^{\text{sat}}(T)).$$

Par conséquent

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_T = \left. \frac{\partial y}{\partial \tau} \right|_T (s_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - s_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)), \quad (3.13)$$

⁵Notons que $\mathbf{w}_\alpha^{\text{sat}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} (\tau_\alpha^{\text{sat}}(T), \varepsilon_\alpha^{\text{sat}}(T))$ tandis que les \mathbf{w}_α^* correspondent à $\mathbf{w}_\alpha^{\text{sat}}(T^*)$ avec T^* solution de l'équation de changement de phase de la définition 2.10 à la page 55.

$$\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{\tau} = \left. \frac{\partial y}{\partial T} \right|_{\tau} (s_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - s_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)) + y(\tau, T) \frac{ds_{\text{liq}}^{\text{sat}}}{dT} + (1 - y(\tau, T)) \frac{ds_{\text{vap}}^{\text{sat}}}{dT}, \quad (3.14)$$

$$\left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} \right|_T = \left. \frac{\partial y}{\partial \tau} \right|_T (\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)), \quad (3.15)$$

$$\left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right|_{\tau} = \left. \frac{\partial y}{\partial T} \right|_{\tau} (\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)) + y(\tau, T) \frac{d\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}}{dT} + (1 - y(\tau, T)) \frac{d\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}}{dT}. \quad (3.16)$$

Il ne reste à calculer que les deux dérivées partielles de la fraction volumique

$$\left. \frac{\partial y}{\partial \tau} \right|_T = \frac{1}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}, \quad (3.17)$$

$$\left. \frac{\partial y}{\partial T} \right|_{\tau} = - \frac{y(\tau, T) \frac{d\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}}{dT} + (1 - y(\tau, T)) \frac{d\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}}{dT}}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}. \quad (3.18)$$

On a donc une forme analytique simple des courbes isentropes dans le plan (τ, P) paramétrées par la température :

$$\tau \mapsto - \left. \frac{\partial \varepsilon^{\text{eq}}}{\partial \tau} \right|_s = \begin{cases} \left. \frac{T}{c_{v\alpha}} \frac{\partial P_{\alpha}}{\partial T} \right|_{\tau} \left. \frac{\partial \varepsilon_{\alpha}}{\partial T} \right|_{\tau} - \left. \frac{\partial \varepsilon_{\alpha}}{\partial \tau} \right|_T & \text{si } \tau \text{ est un état monophasique,} \\ \frac{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} \left(\frac{s_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - s_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right|_{\tau} - 1 \right) & \text{si } \tau \text{ est un état de mélange à l'équilibre} \end{cases}$$

3.5.2. Étude de sa dérivée première et lien avec la vitesse du son

La vitesse du son (qu'on a démontrée au théorème 3.2 être réelle et strictement positive dans chacune des trois zones) est liée à la dérivée première d'une isentrope. Commençons par calculer la dérivée première d'une courbe isentrope, c'est-à-dire la quantité

$$\tau \mapsto - \left. \frac{\partial^2 \varepsilon^{\text{eq}}}{\partial \tau^2} \right|_s = \left. \frac{\partial P^{\text{eq}}}{\partial \tau} \right|_s.$$

En utilisant la relation de Maxwell (voir tableau 2.1 à la page 73)

$$\left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_T = \left. \frac{\partial P}{\partial T} \right|_{\tau}$$

et en posant $\star = P^{\text{eq}}$ dans la relation (3.12), on obtient

$$\left. \frac{\partial P^{\text{eq}}}{\partial \tau} \right|_s = \left. \frac{\partial P}{\partial \tau} \right|_T - \frac{1}{\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{\tau}} \left(\left. \frac{\partial P}{\partial T} \right|_{\tau} \right)^2.$$

Considérons séparément les trois zones : deux zones monophasiques et une zone de mélange à l'équilibre.

☛ États monophasiques

Si (τ, s) est un état monophasique, alors $(\tau, s) = (\tau_{\alpha}, s_{\alpha})$ (α étant liq ou vap) et la loi de changement de phase coïncide avec la loi d'état qui décrit la phase

pure $P^{\text{eq}}(\tau, s) = P_\alpha(\tau_\alpha, s_\alpha)$. Il n'est donc pas nécessaire de passer aux dérivées isothermes pour en calculer la dérivée. Cependant, pour homogénéité avec ce qui suit, on observe que

$$\tau \mapsto \left. \frac{\partial P^{\text{eq}}}{\partial \tau} \right|_s = \left. \frac{\partial P_\alpha}{\partial \tau} \right|_T - \frac{T}{c_{v_\alpha}} \left(\left. \frac{\partial P_\alpha}{\partial T} \right|_\tau \right)^2.$$

✿ États de mélange à l'équilibre

Si (τ, T) correspond à un état de mélange à l'équilibre, sachant que la pression ne dépend que de la température selon la relation

$$(\tau, T) \mapsto P^{\text{eq}} = P^{\text{sat}}(T),$$

le calcul de la dérivée se simplifie et on obtient

$$\left. \frac{\partial P^{\text{eq}}}{\partial \tau} \right|_s = - \frac{1}{\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_\tau} \left(\frac{dP^{\text{sat}}}{dT} \right)^2.$$

Le terme $\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_\tau$ a été déjà calculé en fonction des quantités phasiques à la relation (3.14); pour l'autre terme il suffit de rappeler la relation de Clausius-Clapeyron qui affirme que

$$\frac{dP^{\text{sat}}}{dT} = \frac{s_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T) - s_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}. \quad (3.19)$$

En conclusion la dérivée première d'une isentrope peut être paramétrée par la température et on obtient

$$\tau \mapsto - \left. \frac{\partial^2 \varepsilon^{\text{eq}}}{\partial \tau^2} \right|_s = \begin{cases} \left. \frac{\partial P_\alpha}{\partial \tau} \right|_T - \frac{T}{c_{v_\alpha}} \left(\left. \frac{\partial P_\alpha}{\partial T} \right|_\tau \right)^2 & \text{si } \tau \text{ est un état monophasique,} \\ - \frac{1}{\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_\tau} \left(\frac{s_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T) - s_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)} \right)^2 & \text{si } \tau \text{ est un état de mélange à l'équilibre.} \end{cases}$$

Ayant démontré au théorème 3.3 que $\left. \frac{\partial^2 \varepsilon^{\text{eq}}}{\partial \tau^2} \right|_s > 0$ il suit que $\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_\tau > 0$.

Vitesse du son Par définition le carré de la vitesse du son s'écrit

$$c^2(\tau, s) \stackrel{\text{déf}}{=} -\tau^2 \left. \frac{\partial P^{\text{eq}}}{\partial \tau} \right|_s,$$

donc

$$c(\tau, T) = \begin{cases} c_\alpha = \tau \sqrt{- \left. \frac{\partial P_\alpha}{\partial \tau} \right|_T + \frac{T}{c_{v_\alpha}} \left(\left. \frac{\partial P_\alpha}{\partial T} \right|_\tau \right)^2} & \text{si } \tau \text{ est un état monophasique,} \\ c_m = \frac{s_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T) - s_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)} \frac{\tau}{\sqrt{\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_\tau}} & \text{si } \tau \text{ est un état de mélange à l'équilibre.} \end{cases}$$

3.5.3. Étude de sa dérivée seconde et lien avec la dérivée fondamentale

La dérivée fondamentale, qu'on a supposée être positive dans chacune des trois zones (cf. hypothèses 3.2 et 3.3), est liée à la dérivée seconde d'une isentrope. La convexité de ces courbes est en effet cruciale pour l'étude de l'unicité des solutions du problème de Riemann associé au système (3.5). Commençons par le calcul de la dérivée seconde d'une courbe isentrope, c'est-à-dire la quantité

$$\tau \mapsto - \frac{\partial^3 \varepsilon^{\text{eq}}}{\partial \tau^3} \Big|_s = \frac{\partial^2 p^{\text{eq}}}{\partial \tau^2} \Big|_s.$$

Pour cela on veut passer de nouveau de la dérivée adiabatique à des dérivées isothermes :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 p^{\text{eq}}}{\partial \tau^2} \Big|_s &= \frac{\partial \left(\frac{\partial p^{\text{eq}}}{\partial \tau} \Big|_s \right)}{\partial \tau} \Big|_s = \frac{\partial \left(\frac{\partial p}{\partial \tau} \Big|_T - \frac{\left(\frac{\partial p}{\partial T} \Big|_\tau \right)^2}{\frac{\partial s}{\partial T} \Big|_\tau} \right)}{\partial \tau} \Big|_s = \\ &= \frac{\partial \left(\frac{\partial p}{\partial \tau} \Big|_T \right)}{\partial \tau} \Big|_s - 2 \frac{\frac{\partial p}{\partial T} \Big|_\tau}{\frac{\partial s}{\partial T} \Big|_\tau} \frac{\partial \left(\frac{\partial p}{\partial T} \Big|_\tau \right)}{\partial \tau} \Big|_s + \left(\frac{\frac{\partial p}{\partial T} \Big|_\tau}{\frac{\partial s}{\partial T} \Big|_\tau} \right)^2 \frac{\partial \left(\frac{\partial s}{\partial T} \Big|_\tau \right)}{\partial \tau} \Big|_s. \end{aligned}$$

Il s'agit donc de calculer les trois quantités

$$\frac{\partial \left(\frac{\partial p}{\partial \tau} \Big|_T \right)}{\partial \tau} \Big|_s, \quad \frac{\partial \left(\frac{\partial p}{\partial T} \Big|_\tau \right)}{\partial \tau} \Big|_s, \quad \frac{\partial \left(\frac{\partial s}{\partial T} \Big|_\tau \right)}{\partial \tau} \Big|_s.$$

En utilisant la relation (3.12) avec $\star = \frac{\partial p}{\partial \tau} \Big|_T$, $\star = \frac{\partial p}{\partial T} \Big|_\tau$ et $\star = \frac{\partial s}{\partial T} \Big|_\tau$ on obtient respectivement :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \left(\frac{\partial p}{\partial \tau} \Big|_T \right)}{\partial \tau} \Big|_s &= \frac{\partial^2 p}{\partial \tau^2} \Big|_T - \frac{\frac{\partial p}{\partial T} \Big|_\tau}{\frac{\partial s}{\partial T} \Big|_\tau} \frac{\partial^2 p}{\partial T \partial \tau}, \\ \frac{\partial \left(\frac{\partial p}{\partial T} \Big|_\tau \right)}{\partial \tau} \Big|_s &= \frac{\partial^2 p}{\partial T \partial \tau} - \frac{\frac{\partial p}{\partial T} \Big|_\tau}{\frac{\partial s}{\partial T} \Big|_\tau} \frac{\partial^2 p}{\partial T^2} \Big|_\tau, \\ \frac{\partial \left(\frac{\partial s}{\partial T} \Big|_\tau \right)}{\partial \tau} \Big|_s &= \frac{\partial^2 s}{\partial T \partial \tau} - \frac{\frac{\partial p}{\partial T} \Big|_\tau}{\frac{\partial s}{\partial T} \Big|_\tau} \frac{\partial^2 s}{\partial T^2} \Big|_\tau. \end{aligned}$$

En utilisant l'égalité $\frac{\partial^2 s}{\partial T \partial \tau} = \frac{\partial^2 p}{\partial T^2} \Big|_\tau$, la dérivée seconde s'écrit alors

$$\frac{\partial^2 p}{\partial \tau^2} \Big|_s = \frac{\partial^2 p}{\partial \tau^2} \Big|_T - 3 \frac{\frac{\partial p}{\partial T} \Big|_\tau}{\frac{\partial s}{\partial T} \Big|_\tau} \frac{\partial^2 p}{\partial T \partial \tau} + 3 \left(\frac{\frac{\partial p}{\partial T} \Big|_\tau}{\frac{\partial s}{\partial T} \Big|_\tau} \right)^2 \frac{\partial^2 p}{\partial T^2} \Big|_\tau - \left(\frac{\frac{\partial p}{\partial T} \Big|_\tau}{\frac{\partial s}{\partial T} \Big|_\tau} \right)^3 \frac{\partial^2 s}{\partial T^2} \Big|_\tau.$$

Considérons séparément les trois zones : deux zones monophasiques et une zone de mélange à l'équilibre.

☛ États monophasiques

Si on est dans un état monophasique, de la même façon que pour le calcul de la dérivée première, il n'est pas nécessaire de passer aux dérivées isothermes. Si toutefois on veut utiliser l'expression en fonction des dérivées isothermes (par homogénéité avec ce qui suit), il est utile de remarquer que

$$\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{\tau} = \frac{c_v}{T}, \quad T \left. \frac{\partial^2 P}{\partial T^2} \right|_{\tau} = \left. \frac{\partial c_v}{\partial \tau} \right|_T$$

et donc la dérivée seconde isentropique s'écrit, en fonction des dérivées isothermes, sous la forme

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 p^{eq}}{\partial \tau^2} \right|_s &= \left. \frac{\partial^2 P_{\alpha}}{\partial \tau^2} \right|_T - 3 \frac{T_{\alpha}}{c_{v\alpha}} \left. \frac{\partial P_{\alpha}}{\partial T} \right|_{\tau} \left. \frac{\partial^2 P_{\alpha}}{\partial \tau \partial T} \right|_{\tau} + 3 \frac{T_{\alpha}}{(c_{v\alpha})^2} \left(\left. \frac{\partial P_{\alpha}}{\partial T} \right|_{\tau} \right)^2 \left. \frac{\partial c_{v\alpha}}{\partial \tau} \right|_T + \\ &+ \frac{T_{\alpha}}{(c_{v\alpha})^2} \left(\left. \frac{\partial P_{\alpha}}{\partial T} \right|_{\tau} \right)^3 \left[1 - \frac{T_{\alpha}}{c_{v\alpha}} \left. \frac{\partial c_{v\alpha}}{\partial T} \right|_{\tau} \right]. \end{aligned} \quad (3.20)$$

☛ États de mélange à l'équilibre

Si on est dans un état de mélange à l'équilibre, alors la pression ne dépend que de la température et la dérivée seconde adiabatique se réécrit simplement

$$\left. \frac{\partial^2 p}{\partial \tau^2} \right|_s = \left(\left. \frac{dP}{ds} \right|_{\tau} \right)^2 \left[3 \frac{d^2 P}{dT^2} - \frac{dP}{dT} \left. \frac{\partial^2 s}{\partial T^2} \right|_{\tau} \right]$$

Les dérivées premières $\left. \frac{dP}{dT} \right|_{\tau}$ et $\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{\tau}$ ayant déjà été calculées respectivement aux équations (3.19) et (3.14), on doit réécrire seulement les deux dérivées secondes

$$\frac{d^2 P}{dT^2} \quad \text{et} \quad \left. \frac{\partial^2 s}{\partial T^2} \right|_{\tau}.$$

À partir de la relation de Clausius-Clapeyron (3.19) il est évident que

$$\frac{d^2 p^{sat}}{dT^2} = \frac{\frac{ds_{vap}^{sat}}{dT} - \frac{ds_{liq}^{sat}}{dT}}{\tau_{vap}^{sat}(T) - \tau_{liq}^{sat}(T)} - \frac{s_{vap}^{sat}(T) - s_{liq}^{sat}(T)}{\tau_{vap}^{sat}(T) - \tau_{liq}^{sat}(T)} \frac{\frac{d\tau_{vap}^{sat}}{dT} - \frac{d\tau_{liq}^{sat}}{dT}}{\tau_{vap}^{sat}(T) - \tau_{liq}^{sat}(T)}. \quad (3.21)$$

Pour l'autre terme on observe que

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 s}{\partial T^2} \right|_{\tau} &= \left. \frac{\partial^2 y}{\partial T^2} \right|_{\tau} (s_{liq}^{sat}(T) - s_{vap}^{sat}(T)) + \\ &+ 2 \left. \frac{\partial y}{\partial T} \right|_{\tau} \left(\frac{ds_{liq}^{sat}}{dT} - \frac{ds_{vap}^{sat}}{dT} \right) + \\ &+ y(\tau, T) \frac{d^2 s_{liq}^{sat}}{dT^2} + (1 - y(\tau, T)) \frac{d^2 s_{vap}^{sat}}{dT^2}. \end{aligned}$$

Le terme $\left. \frac{\partial y}{\partial T} \right|_{\tau}$ a été calculé à l'équation (3.18) et il ne reste à calculer que la

dérivée seconde isochore de la fraction volumique :

$$\left. \frac{\partial^2 y}{\partial T^2} \right|_{\tau} = - \frac{y(\tau, T) \frac{d^2 \tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}}{dT^2} + (1 - y(\tau, T)) \frac{d^2 \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}}{dT^2} + 2 \left. \frac{\partial y}{\partial T} \right|_{\tau} \left(\frac{d\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}}{dT} - \frac{d\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}}{dT} \right)}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}. \quad (3.22)$$

Dérivée fondamentale La dérivée fondamentale, définie par

$$\mathfrak{G}^{\text{déf}} = -\frac{1}{2} \tau \frac{\varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}}}{\varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}}} = -\frac{1}{2} \tau \frac{\frac{\partial^2 p^{\text{eq}}}{\partial \tau^2} \Big|_s}{\frac{\partial p^{\text{eq}}}{\partial \tau} \Big|_s},$$

peut se réécrire sous la forme suivante :

$$\mathfrak{G} = \frac{\tau^3}{2c^2} \frac{\partial^2 p}{\partial \tau^2} \Big|_s.$$

Donc on obtient

$$\mathfrak{G} = \begin{cases} \mathfrak{G}_{\alpha} = \frac{\tau^3}{2c_{\alpha}^2} \frac{\partial^2 p_{\alpha}}{\partial \tau^2} \Big|_s & \text{si } \tau \text{ est un état monphasique,} \\ \mathfrak{G}_m = \frac{\tau}{2} \frac{1}{\frac{\partial s}{\partial T} \Big|_{\tau}} \left[3 \frac{d^2 p}{dT^2} - \frac{\frac{dp}{dT}}{\frac{\partial s}{\partial T} \Big|_{\tau}} \frac{\partial^2 s}{\partial T^2} \Big|_{\tau} \right] & \text{si } \tau \text{ est un état de mélange à l'équilibre.} \end{cases}$$

3.6. Quelques propriétés de la loi de changement de phase à la traversée des courbes de saturation

Maintenant on étudie le comportement de la loi de changement de phase à la traversée des courbes de saturation ; on remarquera notamment la discontinuité de la vitesse du son et la perte de concavité des isothermes et des isentropes.

3.6.1. Vitesse du son

Au théorème 3.2 on a établi que la vitesse du son associée à la loi $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ est toujours réelle et strictement positive. Au corollaire 3.2 à la page 86 on a aussi vu que le saut de la vitesse du son $\mathbf{w} \mapsto c$ à travers la courbe de saturation est non nul. À la proposition 3.3 à la page 100 on va évaluer le signe de ce saut. Pour cela prouvons d'abord un résultat qui recueille une série d'observations contenues dans l'annexe A de l'article de Menikoff et Plohr [80, p.120] et qui porte sur les sauts de l'exposant adiabatique γ à travers la courbe de saturation.

► PROPOSITION 3.2:

Le long de la courbe de saturation l'exposant adiabatique γ est plus petit du côté de la zone de mélange que du côté des phases pures. \diamond

PREUVE.

Indiquons avec un $_m$ les quantités évaluées dans la zone de mélange des deux phases et celles non indicées se rapporteront aux variables évaluées dans une des phases pures. D'après les hypothèses sur les énergies monophasiques de la remarque 2.2 à la page 30, d'après l'hypothèse 3.1 à la page 89 et d'après le théorème 3.3 on sait que

$$\begin{aligned} g &> 0, & g_m &> 0, \\ \gamma &> 0, & \gamma_m &> 0, \\ \Gamma &> 0, & \Gamma_m &> 0, \\ g\gamma - \Gamma^2 &> 0, & g_m\gamma_m - \Gamma_m^2 &= 0. \end{aligned}$$

Notons

$$[\![\diamond]\!]_{\text{sat}} \stackrel{\text{def}}{=} \diamond_{\text{phase pure}} - \diamond_{\text{mélange}}$$

le saut à travers la courbe de saturation et

$$[\![\diamond]\!]_{\text{coex}} \stackrel{\text{def}}{=} \diamond_{\text{phase liquide}} - \diamond_{\text{phase vapeur}}$$

le saut à travers la courbe de coexistence. Puisque, à saturation, la température ne dépend que de la pression selon la relation

$$P \mapsto T^{\text{sat}}(P),$$

on a

$$\begin{aligned} \left[\left[\frac{dT}{dP}\right]\right]_{\text{coex}} &= \left[\left[\frac{dT}{ds}\right]_P\right]_{\text{sat}} \frac{ds}{dP}\bigg|_{\text{sat}} + \left[\left[\frac{dT}{dP}\right]_s\right]_{\text{sat}}, \\ \left[\left[\frac{d\tau}{dP}\right]\right]_{\text{sat}} &= \left[\left[\frac{d\tau}{ds}\right]_P\right]_{\text{sat}} \frac{ds}{dP}\bigg|_{\text{sat}} + \left[\left[\frac{d\tau}{dP}\right]_s\right]_{\text{sat}}, \end{aligned}$$

$$\text{où } \frac{ds}{dP}\bigg|_{\text{sat}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{ds(P, T^{\text{sat}}(P))}{dP}.$$

Puisque le volume molaire τ est continu à travers la courbe de saturation et la température T et la pression P sont continues à travers la courbe de coexistence alors, avec la notation introduite, les équations précédentes se réécrivent

$$0 = \left(\frac{dT}{ds}\bigg|_P - \frac{dT_m}{ds}\bigg|_P \right) \frac{ds}{dP}\bigg|_{\text{sat}} + \left(\frac{dT}{dP}\bigg|_s - \frac{dT_m}{dP}\bigg|_s \right), \quad (3.23)$$

$$0 = \left(\frac{d\tau}{ds}\bigg|_P - \frac{d\tau_m}{ds}\bigg|_P \right) \frac{ds}{dP}\bigg|_{\text{sat}} + \left(\frac{d\tau}{dP}\bigg|_s - \frac{d\tau_m}{dP}\bigg|_s \right), \quad (3.24)$$

et clairement : $\frac{dT_m}{ds}\bigg|_P = 0$.

Suivant Menikoff et Plohr [80, p. 119] on rappelle ces trois relations thermodynamiques :

$$\frac{\partial T}{\partial P}\bigg|_s = \frac{\partial \tau}{\partial s}\bigg|_P = \frac{T}{P} \frac{\Gamma}{\gamma}, \quad (3.25)$$

$$\tau dP = -\gamma P d\tau + \Gamma T ds, \quad (3.26)$$

$$\frac{P}{T} \tau dT = -\Gamma P d\tau + g T ds. \quad (3.27)$$

Dans l'article ci-dessus mentionné ces trois relations correspondent respectivement aux relations (A26), (A41) et (A42); la première découle de la relation de Maxwell associée à $\frac{\partial^2 h}{\partial \tau \partial s}$ (voir tableau 2.1 à la page 73), les autres deux sont simplement une écriture des différentielles de la température $T = \varepsilon_s^{\text{eq}}$ et de la pression $P = -\varepsilon_\tau^{\text{eq}}$.

De (3.26) on obtient

$$d\tau = -\frac{\tau}{\gamma P} dP + \frac{\Gamma}{\gamma} \frac{P}{T} ds \quad (3.28)$$

donc

$$\left. \frac{\partial \tau}{\partial P} \right|_s = -\frac{\tau}{\gamma P} \quad \text{et} \quad \left. \frac{\partial \tau}{\partial s} \right|_P = \frac{P}{T} \frac{\Gamma}{\gamma}.$$

De (3.27) et (3.28) on a alors

$$\frac{P}{T} \tau dT = \tau \frac{\Gamma}{\gamma} dP + (\gamma g - \Gamma^2) \frac{T}{\gamma} ds$$

qui implique

$$\left. \frac{\partial T}{\partial s} \right|_P = \frac{T^2}{\tau P} \frac{g\gamma - \Gamma^2}{\gamma}.$$

On peut alors écrire les quatre égalités suivantes

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \tau}{\partial P} \right|_s &= -\frac{\tau}{P} \frac{1}{\gamma}, & \left. \frac{\partial T}{\partial P} \right|_s &= \left. \frac{\partial \tau}{\partial s} \right|_P = \frac{T}{P} \frac{\Gamma}{\gamma}, \\ \left. \frac{\partial \tau}{\partial s} \right|_P &= \frac{P}{T} \frac{\Gamma}{\gamma}, & \left. \frac{\partial T}{\partial s} \right|_P &= \frac{T^2}{\tau P} \frac{g\gamma - \Gamma^2}{\gamma}, \end{aligned}$$

qui, injectées dans (3.23)-(3.24), les transforment en

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\frac{T^2}{\tau P} \frac{g\gamma - \Gamma^2}{\gamma} \right) \left. \frac{ds}{dP} \right|_{\text{sat}} + \left(\frac{T}{P} \frac{\Gamma}{\gamma} - \frac{T_m}{P_m} \frac{\Gamma_m}{\gamma_m} \right), \\ 0 &= \left(\frac{T}{P} \frac{\Gamma}{\gamma} - \frac{T_m}{P_m} \frac{\Gamma_m}{\gamma_m} \right) \left. \frac{ds}{dP} \right|_{\text{sat}} + \left(-\frac{\tau}{P} \frac{1}{\gamma} + \frac{\tau_m}{P_m} \frac{1}{\gamma_m} \right). \end{aligned}$$

Ces égalités se réécrivent respectivement

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{T}{\tau} \frac{g\gamma - \Gamma^2}{\gamma} \left. \frac{ds}{dP} \right|_{\text{sat}} + \left(\frac{\Gamma}{\gamma} - \frac{\Gamma_m}{\gamma_m} \right), \\ 0 &= \frac{T}{\tau} \left(\frac{\Gamma}{\gamma} - \frac{\Gamma_m}{\gamma_m} \right) \left. \frac{ds}{dP} \right|_{\text{sat}} - \left(\frac{1}{\gamma} - \frac{1}{\gamma_m} \right). \end{aligned} \quad (3.29)$$

Puisque $\left. \frac{ds}{dP} \right|_{\text{sat}} = \frac{\tau}{T} \frac{1}{\Gamma} \neq 0$ on obtient

$$-\frac{T}{\tau} \frac{g\gamma - \Gamma^2}{\gamma} \left. \frac{ds}{dP} \right|_{\text{sat}} = \left(\frac{\Gamma}{\gamma} - \frac{\Gamma_m}{\gamma_m} \right) = \frac{\left[\frac{1}{\gamma} - \frac{1}{\gamma_m} \right]}{\frac{T}{\tau} \left. \frac{ds}{dP} \right|_{\text{sat}}},$$

qui donne

$$\frac{\gamma - \gamma_m}{\gamma_m} = (g\gamma - \Gamma^2) \left(\frac{T}{\tau} \right)^2 \left(\frac{ds}{dP} \Big|_{\text{sat}} \right)^2 > 0.$$

On conclut finalement que

$$\gamma > \gamma_m. \quad (3.30)$$

◆

Si on passe maintenant à la vitesse du son on a le résultat suivant qui est bien connu intuitivement et vérifié expérimentalement lorsque le mélange est un vrai mélange physique.

► **PROPOSITION 3.3:**

À la traversée de la courbe de saturation la vitesse du son est plus petite du côté de la zone de mélange que du côté des phases pures. ◇

PREUVE.

Comme dans la preuve précédente, un indice $_m$ indiquera les quantités évaluées dans la zone de mélange des deux phases et celles non indicées se rapporteront aux variables évaluées dans une des phases pures. On a vu à l'équation (3.9) que $c^2 = \gamma P \tau$ donc

$$0 < \frac{\gamma - \gamma_m}{\gamma_m} = \frac{\frac{c^2}{P\tau} - \frac{c_m^2}{P\tau}}{\frac{c_m^2}{P\tau}} = \frac{c^2 - c_m^2}{c_m^2} \quad (3.31)$$

ce qui donne $c > c_m$ (et $c_m > 0$ comme on a vu au théorème 3.1 à la page 79). ◆

On se demande maintenant si on peut généraliser ce résultat, qui est valable seulement au voisinage de la courbe de saturation, à tout le dôme de saturation. En effet cette proposition n'exclut pas les cas pour lesquels la vitesse du son devient plus grande que celle d'une des phases pures pour quelques états dans le dôme de saturation. Une condition suffisante (mais pas nécessaire) pour cela serait par exemple la monotonie de la vitesse du son en fonction du volume. À ce propos on a les propositions suivantes (déjà observées par Menikoff et Plohr [80]).

► **PROPOSITION 3.4:**

Dans le dôme de saturation l'exposant adiabatique γ_m est monotone croissante le long d'une isentrope si et seulement si la dérivée fondamentale \mathfrak{G}_m est supérieure à $(\gamma_m + 1)/2$. ◇

PREUVE.

L'exposant adiabatique dans le dôme de saturation est définie par $\gamma_m = -\frac{\tau}{P} \frac{\partial P}{\partial \tau} \Big|_s$. En dérivant cette quantité le long d'une isentrope on obtient

$$\frac{\partial \gamma_m}{\partial \tau} \Big|_s = -\frac{1 + \gamma_m}{P} \frac{\partial P}{\partial \tau} \Big|_s - \frac{\tau}{P} \frac{\partial^2 P}{\partial \tau^2} \Big|_s = \frac{\gamma_m}{\tau} (1 + \gamma_m - 2\mathfrak{G}_m).$$

Donc $\frac{\partial \gamma_m}{\partial \tau} \Big|_s > 0$ si et seulement si $\mathfrak{G}_m > \frac{\gamma_m + 1}{2}$. ◆

► **PROPOSITION 3.5:**

Dans le dôme de saturation la vitesse du son c_m est monotone croissante le long d'une isentrope si et seulement si la dérivée fondamentale $\mathfrak{G}_m < 1$. ◇

PREUVE.

La vitesse du son dans le dôme de saturation est définie par $c_m = \sqrt{\gamma_m P \tau}$. En dérivant cette quantité le long d'une isentrope on obtient

$$\left. \frac{\partial c_m}{\partial \tau} \right|_s = \frac{\left. \frac{\partial \gamma_m}{\partial \tau} \right|_s P \tau + \gamma_m \left. \frac{\partial P}{\partial \tau} \right|_s \tau + \gamma_m P}{2\sqrt{\gamma_m P \tau}} = \frac{\gamma_m P}{c_m} (1 - \mathfrak{G}_m) = \frac{c_m}{\tau_m} (1 - \mathfrak{G}_m).$$

Donc $\left. \frac{\partial c_m}{\partial \tau} \right|_s > 0$ si et seulement si $\mathfrak{G}_m < 1$. ◆

3.6.2. Isentropes

Étudions maintenant la concavité des courbes isentropes dans le plan (τ, P) , une courbe isentrope étant la projection de $(\tau, s) \mapsto P = -\varepsilon_\tau^{\text{eq}}$ à s fixé.

☞ La fonction $\tau \mapsto P^{\text{eq}}|_s$ est continue sur $]0, +\infty[$.

☞ Pour tout s fixé il existe deux points τ_{liq}^* et τ_{vap}^* où la dérivée $\left. \frac{\partial P^{\text{eq}}}{\partial \tau} \right|_s$ n'est pas définie.

☞ Puisque

$$\left. \frac{\partial P^{\text{eq}}}{\partial \tau} \right|_s = -\varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}} = -\gamma \frac{P^{\text{eq}}}{\tau} \quad \left(= -\frac{c^2}{\tau^2} \right),$$

les isentropes sont strictement décroissantes sur $(0, +\infty)$.

☞ Pour en étudier la convexité, on regarde le signe de $\left. \frac{\partial^2 P^{\text{eq}}}{\partial \tau^2} \right|_s$ pour les états n'appartenant pas à la courbe de saturation :

• dans $]0, \tau_{\text{liq}}^*[$ et dans $]\tau_{\text{vap}}^*, +\infty[$, on a l'hypothèse 3.2 à la page 90 qui implique

$$\left. \frac{\partial^2 P^{\text{eq}}}{\partial \tau^2} \right|_s = -\varepsilon_{\tau\tau\tau}^{\text{eq}} > 0;$$

• dans $]\tau_{\text{liq}}^*, \tau_{\text{vap}}^*[$, on a l'hypothèse 3.3 à la page 91 qui implique de nouveau

$$\left. \frac{\partial^2 P^{\text{eq}}}{\partial \tau^2} \right|_s > 0.$$

Par conséquent les isentropes sont strictement convexes séparément dans $]0, \tau_{\text{liq}}^*[$, dans $]\tau_{\text{liq}}^*, \tau_{\text{vap}}^*[$ et dans $]\tau_{\text{vap}}^*, +\infty[$.

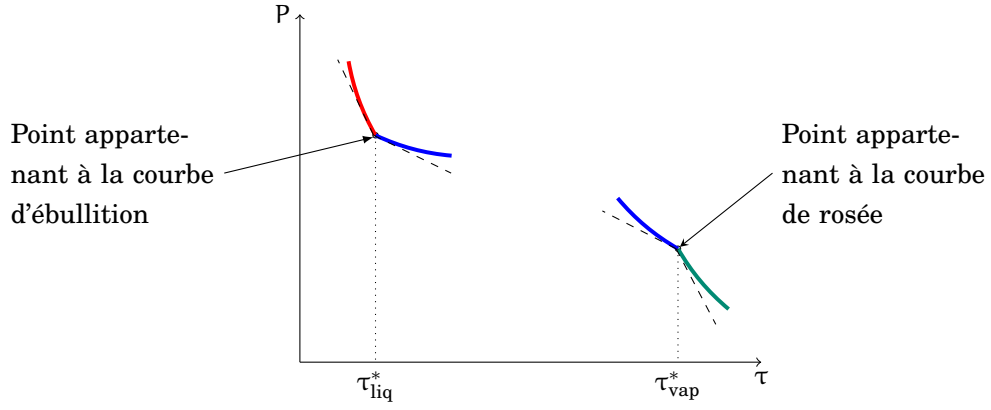
Pour étudier la convexité *globale* des isentropes, notamment le comportement au voisinage de la courbe de saturation, on cherche maintenant à caractériser la position des courbes en ces points en analysant la variation de pente des droites tangentes.

► PROPOSITION 3.6:

Les courbes isentropes dans le plan (τ, P) sont convexes à la traversée de la courbe d'ébullition et non convexes à la traversée de la courbe de rosée. ◆

PREUVE.

D'après les hypothèses 3.2 à la page 90 et 3.3 à la page 91 sur la dérivée fondamentale respectivement dans les états monophasiques et dans les états de mélange à l'équilibre, on sait que $\mathfrak{G} > 0$ et $\mathfrak{G}_m > 0$. Donc les isentropes se situent toujours au-dessus


 FIG. 3.1.: Isentropes $\tau \mapsto P|_s$ à la traversée de la courbe de saturation

de leurs droites tangentes. Puisque

$$\gamma \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\tau}{P} \frac{\partial P}{\partial \tau} \Big|_s$$

et puisqu'on a démontré à la proposition 3.2 à la page 97 que l'exposant adiabatique est plus petit dans le mélange à l'équilibre que dans les phases pures $\gamma > \gamma_m$, à partir de la définition d'isentrope on voit que le saut des pentes des tangentes au voisinage de la courbe de saturation est tel que

$$\begin{aligned} \left[\left[\frac{\partial P}{\partial \tau} \right]_s \right]_{\text{ébull}} &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial P_{\text{liq}}}{\partial \tau} \Big|_s - \frac{\partial P_m}{\partial \tau} \Big|_s = -\frac{\tau_{\text{liq}}^*}{P} (\gamma_{\text{liq}} - \gamma_m) < 0, \\ \left[\left[\frac{\partial P}{\partial \tau} \right]_s \right]_{\text{rosée}} &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial P_m}{\partial \tau} \Big|_s - \frac{\partial P_{\text{vap}}}{\partial \tau} \Big|_s = -\frac{\tau_{\text{vap}}^*}{P} (\gamma_m - \gamma_{\text{vap}}) > 0. \end{aligned}$$

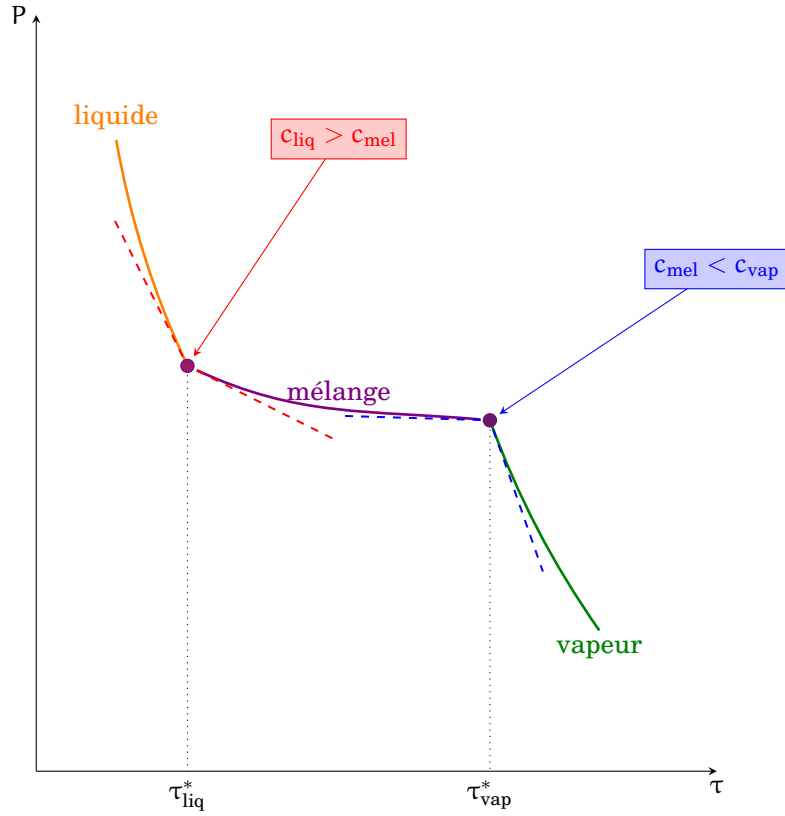
On conclut donc que les courbes isentropes sont convexes à la traversée de la courbe d'ébullition et non convexes à la traversée de la courbe de rosée. ♦

À la traversée de la courbe de saturation les isentropes $\tau \mapsto P|_s$ ont donc l'allure de la figure 3.1, allure qui diffère selon qu'on traverse la courbe d'ébullition ou de rosée (ces deux courbes ayant été définies à la définition 2.1 à la page 33).

On peut donc conclure qu'une courbe isentrope a qualitativement l'allure de la figure 3.2 à la page suivante.

☞ **DÉFINITION 3.4.** *Un point de la courbe de saturation est dit normal si l'isentrope passant par ce point est localement convexe. Sinon il est dit rétrograde.*

D'après la proposition 3.6 à la page précédente la courbe d'ébullition est un ensemble de points normaux tandis que la courbe de rosée est un ensemble de points rétrogrades. Remarquons qu'on peut avoir d'autres points rétrogrades à l'extérieur du dôme de saturation car il suffit que $\mathfrak{G} \leq 0$ comme pour les fluides mentionnés à la note 4 à la page 90.


 FIG. 3.2.: Isentrope $\tau \mapsto P|_s$

3.6.3. Dôme de saturation et point critique

Par définition $\gamma = -\frac{\tau}{P} \frac{dP}{d\tau}|_s$, donc l'exposant adiabatique mesure la pente des isentropes dans le plan (τ, P) . Pour étudier comment cette pente varie à travers la courbe de saturation on va la comparer avec la pente de cette dernière qui est mesurée par la quantité suivante :

$$\xi \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\tau}{P} \frac{dP}{d\tau} \Big|_{\text{sat}}.$$

On peut alors démontrer la propriété suivante.

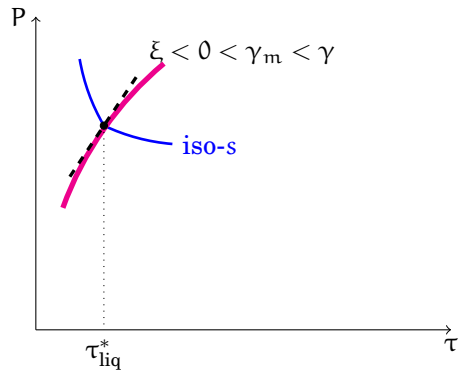
➡ **PROPOSITION 3.7:**

Au voisinage des courbes de saturation $\xi \neq 0$ et $\text{sgn}(\xi - \gamma) = \text{sgn}(\xi - \gamma_m)$. ◇

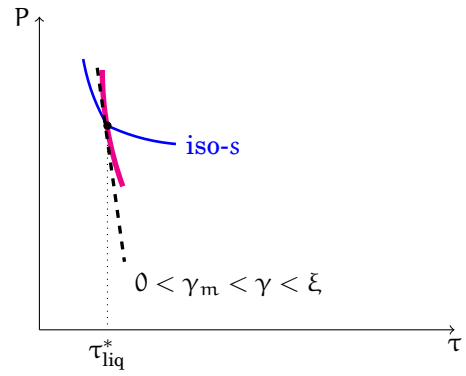
PREUVE.

Si on note $[\diamond] \stackrel{\text{def}}{=} \diamond_{\text{phase pure}} - \diamond_{\text{mélange}}$ le saut à travers la courbe de saturation et si on indique $\frac{d\star}{dP}|_{\text{sat}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d\star(P, T^{\text{sat}}(P))}{dP}$, suivant Menikoff et Plohr [80] on a

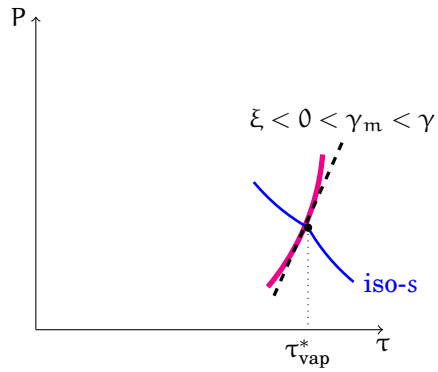
$$\begin{aligned} \left[\left[\frac{ds}{dP} \right] \right]_{\text{sat}} &= \left[\left[\frac{ds}{d\tau} \right] \right]_P \frac{d\tau}{dP} \Big|_{\text{sat}} + \left[\left[\frac{ds}{dP} \right] \right]_{\tau} = \\ &= \left(\frac{ds}{d\tau} \Big|_P - \frac{ds_m}{d\tau} \Big|_P \right) \frac{d\tau}{dP} \Big|_{\text{sat}} + \left(\frac{ds}{dP} \Big|_{\tau} - \frac{ds_m}{dP} \Big|_{\tau} \right). \end{aligned}$$



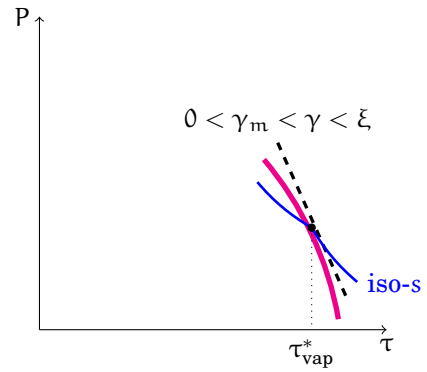
(a) Courbe d'ébullition (en rouge) avec pente positive ($\xi < 0$) et allure de l'isentrope (en bleu)



(b) Courbe d'ébullition (en rouge) avec pente négative ($\xi > 0$) et allure de l'isentrope (en bleu)



(c) Courbe de rosée (en rouge) avec pente positive ($\xi < 0$) et allure de l'isentrope (en bleu) : on remarque la perte de convexité de l'isentrope. Physiquement ce cas est à exclure (voir la remarque 3.1 à la page suivante)



(d) Courbe de rosée (en rouge) avec pente négative ($\xi > 0$) et allure de l'isentrope (en bleu) : on remarque la perte de convexité de l'isentrope

FIG. 3.3.: Courbes isentropes et pente de la courbe de saturation

À partir de la définition de Γ et de la relation (3.26) on peut facilement vérifier que⁶

$$\left. \frac{\partial s}{\partial P} \right|_{\tau} = \frac{\tau}{T \Gamma} \quad \text{et} \quad \left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_P = \frac{P}{T \Gamma}.$$

Puisque le volume molaire τ , l'entropie s , la température T et la pression P sont continues à travers la courbe de saturation, si on indique avec un $_m$ les quantités évaluées dans la zone de mélange des deux phases alors que celles non indicées se rapporteront aux variables évaluées dans une des phases pures, on obtient

$$0 = \frac{P}{T} \left(\frac{\gamma}{\Gamma} - \frac{\gamma_m}{\Gamma_m} \right) \left. \frac{d\tau}{dP} \right|_{\text{sat}} + \frac{\tau}{T} \left(\frac{1}{\Gamma} - \frac{1}{\Gamma_m} \right).$$

Puisque $\left. \frac{d\tau}{dP} \right|_{\text{sat}} \neq 0$ (c'est-à-dire $\xi \neq 0$: on exclut le cas $c_{v1} = c_{v2}$ des gaz parfaits), cette égalité se réécrit

$$\left(\frac{1}{\Gamma} - \frac{1}{\Gamma_m} \right) \left. \frac{dP}{d\tau} \right|_{\text{sat}} = \frac{P}{\tau} \left(\frac{\gamma}{\Gamma} - \frac{\gamma_m}{\Gamma_m} \right).$$

Puisque $\gamma \neq \gamma_m$ (cf. proposition 3.2 à la page 97), alors $\Gamma \neq \Gamma_m$ et on obtient

$$\left. \frac{dP}{d\tau} \right|_{\text{sat}} = \frac{P}{\tau} \frac{\gamma \Gamma_m - \gamma_m \Gamma}{\Gamma - \Gamma_m}.$$

Donc

$$\xi = \frac{\gamma \Gamma_m - \gamma_m \Gamma}{\Gamma_m - \Gamma} \quad \text{d'où} \quad \frac{\xi - \gamma}{\xi - \gamma_m} = \frac{\Gamma}{\Gamma_m}. \quad (3.32)$$

Puisqu'on a démontré que $\Gamma_m > 0$ et on a supposé $\Gamma > 0$, on a bien $\text{sgn}(\xi - \gamma) = \text{sgn}(\xi - \gamma_m)$. ♦

Ce résultat était prévisible car autrement les isentropes ne traverseraient pas le dôme de saturation. En réalité, Menikoff et Plohr [80] et Perrier [85] échangent hypothèse et thèse car ils utilisent cette remarque «géométrique» pour montrer que $\Gamma_m > 0$, mais cela serait valable seulement proche de la courbe de saturation alors qu'ici nous avons pu le démontrer analytiquement dans tout le dôme de saturation.

★ **REMARQUE 3.1.** Dans le plan (τ, P) on a vu que γ mesure la pente des isentropes tandis que ξ mesure la pente de la courbe de saturation. De la proposition 3.7 on déduit que seulement deux cas peuvent se présenter (voir figure 3.3 à la page ci-contre) :

☛ ou bien

$$0 < \gamma_m < \gamma < \xi$$

et donc

$$\frac{\xi - \gamma}{\xi - \gamma_m} < 1$$

ce qui implique

$$0 < \Gamma < \Gamma_m < \gamma_m < \gamma < \xi$$

(le cas $\gamma_m < \xi < \gamma$ ne permettant pas aux isentropes de traverser la courbe de

⁶Par définition $\Gamma = -\frac{\tau}{T} \varepsilon_{\tau s} = \frac{\tau}{T} \left. \frac{\partial P}{\partial s} \right|_{\tau}$ et de l'hypothèse 3.1 à la page 89 on a $\left. \frac{\partial P}{\partial s} \right|_{\tau} > 0$.

saturation);

ou bien

$$\xi < 0 < \gamma_m < \gamma$$

et donc

$$\frac{\xi - \gamma}{\xi - \gamma_m} > 1$$

ce qui implique

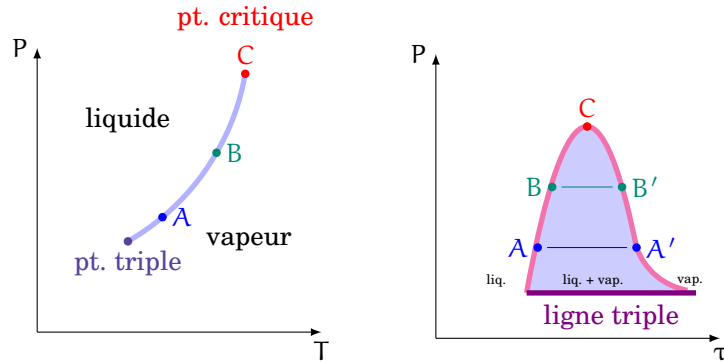
$$\begin{cases} \xi < 0 < \Gamma_m < \gamma_m < \gamma, \\ \Gamma_m < \Gamma, \end{cases}$$

(le cas $0 < \xi < \gamma_m < \gamma$ ne permettant pas aux isentropes de traverser la courbe de saturation). ❀

On voit donc que, avec les hypothèses faites, la courbe de saturation peut ne pas avoir de point critique (un exemple sera donné au chapitre 5).

3.6.4. Isothermes

En ce qui concerne les isothermes on a les figures suivantes :



Un état appartenant à la *courbe de coexistence* (points A ou B dans la figure de gauche) correspond à un segment d'isotherme (AA' ou BB' dans la figure de droite). Le théorème 2.9 à la page 50 a montré que, à partir de la donnée de l'entropie de chaque phase, on peut déterminer chaque extrémité de ce segment. La réunion de ces extrémités définit, dans le plan (τ, P) , la *courbe de saturation*. Notons que puisque le changement de phase a lieu à pression P et température T constantes, les segments isothermes AA' et BB' sont horizontaux dans le plan (τ, P) .

★ **REMARQUE 3.2.** Physiquement on trouve que ξ est strictement positif le long de la courbe de rosée, par contre il n'est pas nécessairement négatif le long de la courbe d'ébullition donc a priori les deux courbes peuvent ne pas se rejoindre (ce sera le cas de l'exemple au chapitre suivant). Supposons maintenant que $\xi \leq 0$ le long de la courbe d'ébullition, alors elle rejoint la courbe de rosée en un point. Si en ce point $(\tau, \varepsilon, s)_1^* = (\tau, \varepsilon, s)_2^*$ alors ce point est appelé *point critique* et ici le segment r_{12} se réduit à un point. Soit $\mathbf{w}_C \stackrel{\text{def}}{=} (\tau_c, \varepsilon_c)$ l'état correspondant au point critique, les valeurs

de température et pression associées représentent la borne supérieure de la courbe de coexistence. Si on regarde le comportement de la loi à saturation lorsque $T \rightarrow T_c$ on a

$$\lim_{T \rightarrow T_c} \tau_\alpha^* = \tau_c \quad \text{et} \quad \lim_{T \rightarrow T_c} \varepsilon_\alpha^* = \varepsilon_c, \quad \alpha = 1, 2$$

donc

$$\lim_{\mathbf{w} \rightarrow \mathbf{w}_c} s^{\text{eq}}(\tau_\alpha^*, \varepsilon_\alpha^*) = s^{\text{eq}}(\mathbf{w}_c) = s_\alpha(\mathbf{w}_c).$$

La transition de phase devient une transition continue, une «non-transition». L'entropie à saturation $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ est continue et n'a plus de zone linéaire (le segment de droite τ_{12} se réduit à un point) mais, à priori, elle présente encore des discontinuité sur les dérivées secondes. Enfin, les fractions (y, z, ψ) perdent leur sens.

Inversement, puisque le point triple $\mathbf{w}_3 \stackrel{\text{déf}}{=} (\tau_3, \varepsilon_3)$ est associé aux valeurs de pression et température qui représentent la borne inférieure de la courbe de coexistence, on a coexistence de trois phases (vapeur, liquide et solide) et $(P, T, g) = (P, T, g)_3$ sont uniques! Graphiquement on peut visualiser cette construction dans l'espace (τ, ε, s) comme l'enveloppe concave de trois entropies (une surface pour chaque phase) : la surface d'équilibre présente une facette plane (l'équivalente du segment τ_{12}) où la température, la pression et l'enthalpie libre sont fixes. Au diagramme (P, T) toute la zone d'invariance est représentée par le point (P_3, T_3) . ❀

3.7. Conclusion

On a vu au chapitre précédent qu'il existe une loi d'état qui décrit l'équilibre thermodynamique d'un fluide entre sa phase liquide et sa phase vapeur et qui rend effectivement compte des phénomènes de changement de phase. Quand on l'associe aux équations de bilan (de masse, de quantité de mouvement et d'énergie totale), on peut alors décrire l'écoulement d'un fluide qui, de plus, est lieu d'un changement de phase. On obtient ainsi un modèle continu qui permet d'étudier le mouvement des phases liquide et vapeur de même que celui de l'ensemble des zones interfaciales, qui prend en compte le changement de phase et ceci avec *un seul système d'équations aux dérivées partielles*.

Cela constitue un résultat important : on a un unique modèle physiquement cohérent qui décrit le mouvement d'un fluide sein de changements de phase même en considérant les interfaces liquide-vapeur comme des zones volumiques de transition et qui coïncide avec les équations d'Euler classiques dans les phases pures. Ainsi ces équations régissent le mouvement de l'ensemble du système diphasique, à savoir l'ensemble des phases liquide et vapeur ainsi que l'ensemble des interfaces considérées.

Ce résultat est extrêmement important surtout du point de vue de la simulation numérique : cette modélisation permet de ne plus considérer les interfaces liquide-vapeur comme des frontières mobiles du système sur lesquelles on doit imposer des conditions aux limites, mais comme des parties de la solution. Donc, si l'on sait résoudre numériquement le système, on n'a plus à s'occuper des interfaces car elles font intégralement

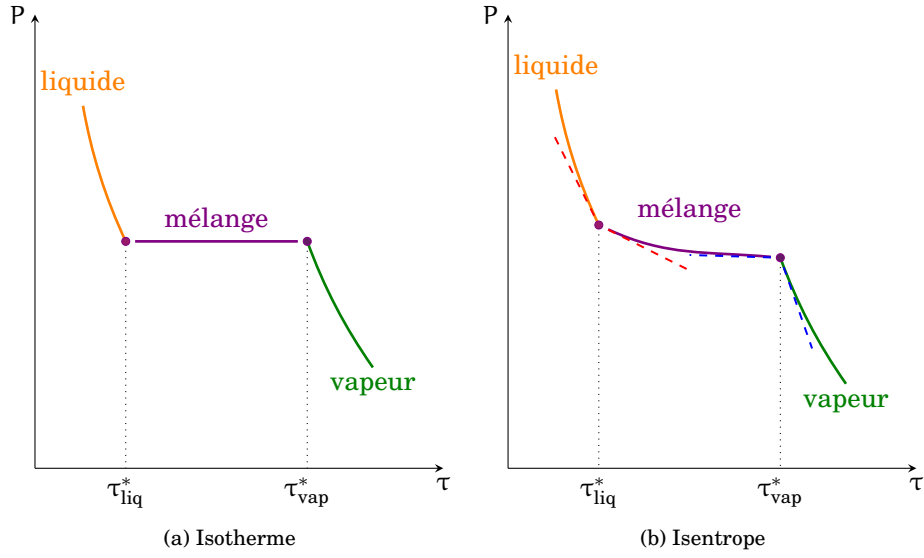


FIG. 3.4.: Perte de convexité des isothermes et des isentropes à la traversée de la courbe de saturation

partie de la solution générale et évolueront sans que l'on ait à les gérer de manière particulière.

Une fois établi ce système d'équations aux dérivées partielles, on en a étudié quelques propriétés mathématiques. Tout d'abord on a prouvé la *stricte hyperbolicité* du système des équations d'Euler muni de cette loi d'état. Remarquons que la construction décrite et la stricte hyperbolicité du système des équations d'Euler sont valables pour une très large classe de lois d'état car, outre une hypothèse de régularité, les seules hypothèses nécessaires sont celles qui qualifient classiquement la stabilité d'un corps pur homogène. Il y a tout de même le problème de la *discontinuité de la vitesse du son* car la *théorie des système hyperboliques repose sur l'hypothèse de flux de classe C^1* , hypothèse qui n'est plus satisfaite lorsqu'on traverse l'interface. On examinera de ce problème au prochain chapitre mais, pour cela, on a d'abord prouvé (ou parfois supposé) un certain nombre d'inégalités, dont on rappelle ci-dessous les plus significatives, qui seront nécessaires au prochain chapitre :

☛ pour tout état \mathbf{w} (i.e. monophasique ou de mélange à l'équilibre)

$$\begin{array}{lll} s_{\tau\tau}^{\text{eq}} < 0, & \varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}} > 0, & \gamma > 0, \\ s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} < 0, & \varepsilon_{ss}^{\text{eq}} > 0, & g > 0, \\ Ps_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} < s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}}, & \varepsilon_{\tau s}^{\text{eq}} < 0, & \Gamma > 0, \\ & \varepsilon_{\tau\tau\tau}^{\text{eq}} < 0, & \mathfrak{G} > 0; \end{array}$$

☛ si \mathbf{w} est un état monophasique

$$s_{\tau\tau}^{\text{eq}} s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} > (s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}})^2, \quad \varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}} \varepsilon_{ss}^{\text{eq}} > (\varepsilon_{s\tau}^{\text{eq}})^2, \quad g\gamma - \Gamma^2 > 0;$$

☞ si \mathbf{w} est un état de mélange à l'équilibre

$$\begin{aligned} s_{\tau\tau}^{\text{eq}} s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} &= (s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}})^2, & \varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}} \varepsilon_{ss}^{\text{eq}} &= (\varepsilon_{s\tau}^{\text{eq}})^2, & g\gamma - \Gamma^2 &= 0, \\ s_{\tau\tau}^{\text{eq}} &< P s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}}, & T \varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}} &> -P \varepsilon_{s\tau}^{\text{eq}}, & \gamma &> \Gamma, \\ s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}} &> 0. \end{aligned}$$

Ces inégalités permettent d'affirmer que les courbes isothermes et les courbes isentropes ont le profil décrit dans la figure 3.4 à la page ci-contre.



Annexe 3.A Dérivée fondamentale et modèle de Van der Waals

On a vu dans l'annexe 2.A à la page 57 que l'équation d'état du modèle de Van der Waals s'écrit

$$(\tau, s) \mapsto \varepsilon \stackrel{\text{def}}{=} (\tau - b)^{-\frac{r}{c_v}} \exp\left(\frac{s}{c_v}\right) - \frac{a}{\tau}, \quad 0 < b < \tau < +\infty,$$

d'où on déduit

$$\begin{aligned} T(\tau, s) &\stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} \right|_{\tau} = \frac{1}{c_v} (\tau - b)^{-\frac{r}{c_v}} \exp\left(\frac{s}{c_v}\right), \\ P(\tau, s) &\stackrel{\text{def}}{=} - \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} \right|_s = \frac{r}{c_v} (\tau - b)^{-\frac{r}{c_v}-1} \exp\left(\frac{s}{c_v}\right) - \frac{a}{\tau^2}. \end{aligned}$$

On a aussi vu qu'avec cette loi on définit deux zones très importantes :

- ☞ le dôme de saturation, construit à partir de la correction de Maxwell à l'aide de la loi des aires égales,
- ☞ la zone spinodale, contenue dans le dôme de saturation, dans laquelle les isothermes sont croissantes par rapport au volume molaire.

À partir de la loi d'état complète $(\tau, s) \mapsto \varepsilon$ on peut calculer l'exposant adiabatique γ , le coefficient de Grüneisen Γ et la chaleur spécifique adimensionnée g ; on obtient

$$\begin{aligned} \gamma &= -\frac{\tau}{P} \left. \frac{\partial P}{\partial \tau} \right|_s = \left(\frac{r}{c_v} + 1 \right) \frac{\tau}{\tau - b} \frac{P + \frac{a}{\tau^2}}{P} - \frac{2a}{P\tau^2}, \\ \Gamma &= \frac{\tau}{T} \left. \frac{\partial P}{\partial s} \right|_{\tau} = \frac{r}{c_v} \frac{\tau}{\tau - b}, \\ g &= \frac{\tau P}{c_v T} = \frac{r}{c_v} \frac{\tau}{\tau - b} - \frac{a}{\tau(\tau - b)^{-\frac{r}{c_v}} \exp\left(\frac{s}{c_v}\right)}. \end{aligned}$$

Dans la zone spinodale $\gamma < 0$: la vitesse du son n'est pas réelle. En revanche, entre la courbe de saturation et la courbe délimitant la zone spinodale, le système des équations d'Euler est hyperbolique car $\gamma > 0$. Les états appartenant à cette zone et vérifiant la loi de Van der Waals sont connus pour être des états métastables, dans le sens où une petite perturbation de ces états les fait basculer violemment vers un équilibre stable dans une autre phase et on parle de retard du changement de phase.

Pour une loi d'état de type Van der Waals, loin de la saturation, la dérivée fondamentale \mathfrak{G} est positive mais, dans la phase vapeur, il existe une zone proche du point critique dans laquelle $\mathfrak{G} < 0$: cette loi ne respecte donc pas toujours l'hypothèse 3.1 à la page 89 et ceci même en dehors du dôme de saturation. En effet, la dérivée fondamentale pour la loi de Van der Waals s'écrit

$$\begin{aligned}\mathfrak{G}^{\text{def}} &= \frac{\tau^2}{2\gamma P} \frac{\partial^2 P}{\partial \tau^2} \Big|_s = \frac{\tau^2}{2\gamma P} \left[\left(\frac{r}{c_v} + 2 \right) \frac{\left(\frac{2a}{\tau^3} - \frac{\partial P}{\partial \tau} \Big|_s \right)}{\tau - b} - \frac{6a}{\tau^4} \right] = \\ &= \frac{\tau^2}{2\gamma P} \left[\left(\frac{r}{c_v} + 1 \right) \left(\frac{r}{c_v} + 2 \right) \frac{P + \frac{a}{\tau^2}}{(\tau - b)^2} - \frac{6a}{\tau^4} \right].\end{aligned}$$

À la figure 3.5 à la page suivante on a représenté la courbe qui délimite la zone spinodale (définie par $\gamma = 0$) et la courbe qui délimite la zone dans laquelle les isentropes sont concaves (définie par $\mathfrak{G} = 0$). On voit donc que la perte de convexité des isentropes n'est pas une particularité des changements de phase mais elle a lieu aussi dans une zone monophasique. Ceci se révèle crucial pour la résolution du problème de Riemann.

Dans la thèse de Voß [96] on trouve l'étude complète du problème de Riemann pour une loi d'état de type Van der Waals avec une analyse très détaillée de toutes les combinaisons possibles de deux états initiaux appartenant à la même phase ou à deux phases distinctes et appartenant à une zone avec

- ☛ isentropes régulières et convexes,
- ☛ isentropes régulières mais avec un ou deux changements de concavité,
- ☛ isentropes irrégulières (donc avec traversée de la courbe de saturation) et donc non convexes.

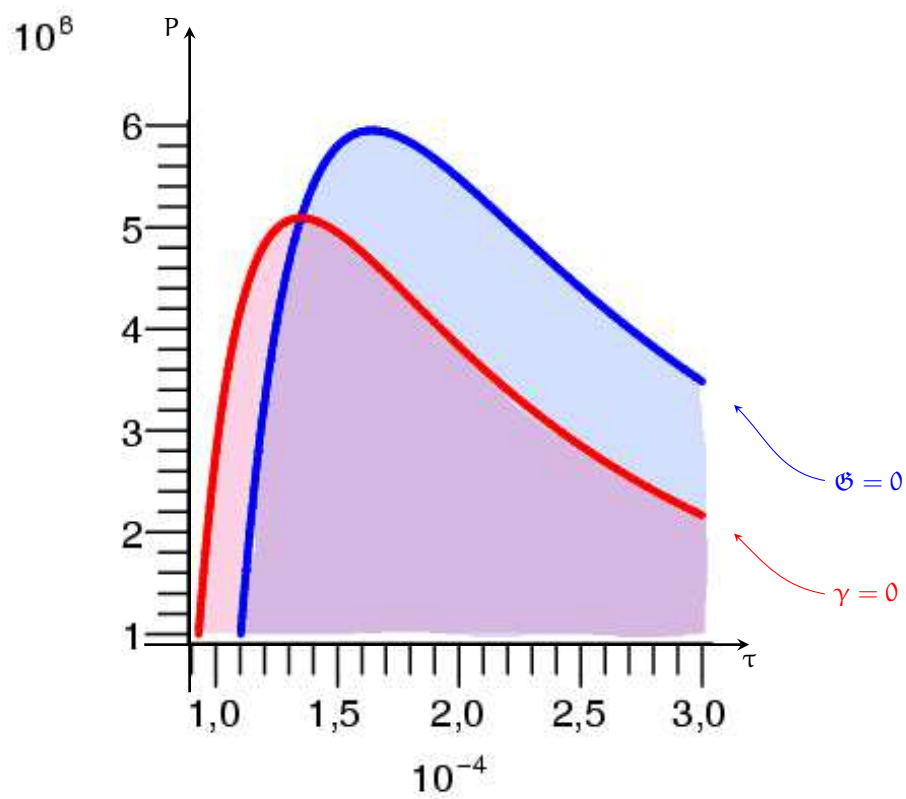


FIG. 3.5.: Modèle de Van der Waals : zone de perte de convexité des isentropes (en bleu) et zone spinodale (en rose)

CHAPITRE 4

Quelques observations sur le problème de Riemann

4.1 Généralités sur le problème de Riemann	113
4.2 Problème de Riemann dans une zone homogène.	114
4.2.1 Nature des champs caractéristiques	115
4.2.2 Existence et unicité des solutions du problème de Riemann	116
4.3 Problème de Riemann avec changement de phase	118
4.3.1 Existence et unicité des solutions du problème de Riemann	119
4.4 Conclusion.	120

Résumé

DANS CE CHAPITRE nous rappelons d'abord le cadre mathématique pour l'étude du système de changement de phase introduit au chapitre 3. Nous verrons que le problème de Riemann est bien posé dans des zones homogènes (phase pure ou mélange à l'équilibre) mais qu'il admet plus d'une solution entropique si on prend en compte le changement de phase. Dans ce cas on peut récupérer l'unicité en utilisant le critère de Liu.

Sans perte de généralité, l'ensemble des études menées dans ce chapitre est présenté dans un cadre monodimensionnel.

4.1. Généralités sur le problème de Riemann

On s'intéresse aux solutions faibles au sens des distributions du problème de Riemann associé au système (3.5), c'est-à-dire à la construction de solutions autosimilaires

$\mathbf{U}(x, t) = \tilde{\mathbf{U}}(\frac{x}{t})$ pour une donnée initiale discontinue constituée de deux états constants

$$\mathbf{U}(x, t = 0) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \mathbf{U}_\ell & \text{pour } x < 0, \\ \mathbf{U}_r & \text{pour } x > 0. \end{cases}$$

En variables lagrangiennes ce problème se réécrit

$$D_t \mathbf{V} + \partial_x (\mathbf{F}(\mathbf{V})) = \mathbf{0}$$

avec une donnée initiale constante par morceaux

$$\mathbf{V}(x, t = 0) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \mathbf{V}_\ell & \text{pour } x < 0, \\ \mathbf{V}_r & \text{pour } x > 0. \end{cases}$$

Ici le vecteur des quantités conservées \mathbf{V} et le flux $\mathbf{F}(\mathbf{V})$ sont déterminés par

$$\mathbf{V} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, u, e)^t, \quad \mathbf{F}(\mathbf{V}) \stackrel{\text{def}}{=} (-u, P, Pu)^t.$$

Lorsque les états gauche \mathbf{U}_ℓ et droite \mathbf{U}_r appartiennent à la même phase, le problème de Riemann se résout en général en juxtaposant des états constants et des ondes simples (chocs ou raréfactions) et un critère pour choisir la solution physique consiste à choisir l'unique solution entropique. On verra que si les états gauche et droite appartiennent à la zone de mélange à l'équilibre alors c'est encore le cas mais s'ils appartiennent à deux zones différentes (autrement dit, si on prend en compte le changement de phase en traversant la courbe de saturation) les choses se compliquent : le critère entropique ne garantit plus l'unicité de la solution.

4.2. Problème de Riemann dans une zone homogène (phase pure ou mélange à l'équilibre)

Une vaste littérature traite le problème de Riemann lorsque la loi d'état $(\tau, \varepsilon) \mapsto P$ représente une phase pure et satisfait les hypothèses de monotonie (2.3), de concavité (2.4) ainsi que les hypothèse 3.1 à la page 89 et 3.2 à la page 90. Citons par exemple les livres de Benzoni-Gavage et Serre [14], Godlewski et Raviart [40; 41], Kulikovskii *et al.* [62], LeVeque [70; 71], Serre [91].

Le principe de base de construction de la solution repose essentiellement sur des invariants et sur l'hyperbolicité du système. Ces propriétés demandent que la solution soit constituée de différentes ondes dans le continuum spatio-temporel, ondes qui correspondent aux vitesses caractéristiques. De plus, il existe une bijection entre une onde dans le diagramme (x, t) et les états dans l'espace des phases qui peuvent être reliés par cette onde. Chacune de ces ondes appartient à des courbes à un paramètre et la solution au problème de Riemann est donnée par l'intersection de différentes courbes correspondant au champs caractéristiques dans l'espace des phases reliant les

deux états initiaux. Il est donc clair que le point crucial pour résoudre le problème de Riemann est la construction des ondes dans l'espace des phases.

Pour étudier les différentes courbes il faut d'abord étudier les vitesses caractéristiques et les champs associés.

4.2.1. Nature des champs caractéristiques

☞ **DÉFINITION 4.1.** On appelle *champ caractéristique* un couple (λ, Λ) , où λ est une vitesse caractéristique et Λ le sous-espace propre associé.

Pour étudier le problème de Riemann associé au système (3.5), on commence par analyser la structure des trois champs. Pour cela il est plus simple de travailler en variables (τ, u, s) . On réécrit donc le système des équations d'Euler sous la forme

$$\partial_t \begin{pmatrix} \tau \\ u \\ s \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} u & -1 & 0 \\ \frac{\partial p^{\text{eq}}}{\partial \tau} \Big|_s & u & \frac{\partial p^{\text{eq}}}{\partial s} \Big|_\tau \\ 0 & 0 & u \end{pmatrix} \partial_x \begin{pmatrix} \tau \\ u \\ s \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

avec $p^{\text{eq}} = -\frac{\partial \varepsilon^{\text{eq}}}{\partial \tau} \Big|_s$. On rappelle que dans une zone homogène p^{eq} est continue ainsi que ses dérivées partielles $\frac{\partial p^{\text{eq}}}{\partial \tau} \Big|_s$ et $\frac{\partial p^{\text{eq}}}{\partial s} \Big|_\tau$ (ces dernières ne le seront plus lorsqu'on prendra en compte le changement de phase).

La matrice jacobienne du flux a les trois valeurs propres

$$\lambda_1 \stackrel{\text{def}}{=} u - c < \lambda_2 \stackrel{\text{def}}{=} u < \lambda_3 \stackrel{\text{def}}{=} u + c$$

et les trois vecteurs propres (à droite) associés

$$\mathbf{r}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \tau \\ c \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_2 \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \partial p^{\text{eq}} / \partial s \\ 0 \\ \partial p^{\text{eq}} / \partial \tau \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_3 \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \tau \\ -c \\ 0 \end{pmatrix},$$

où c est toujours la vitesse du son dont le carré se réécrit, en variables (τ, u, s) ,

$$c^2 = -\tau^2 \frac{\partial p^{\text{eq}}}{\partial \tau} \Big|_s = \tau^2 \varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}}.$$

On rappelle que c est réelle et strictement positive ce qui donne la stricte hyperbolicité (théorème 3.2 à la page 84).

On est maintenant en mesure de caractériser les trois champs.

⇒ **PROPOSITION 4.1:**

Si l'état (τ, s) appartient à une phase pure ou est un état de mélange à l'équilibre alors

☛ *le 2-champ est linéairement dégénéré,*

☛ *les 1-champ et 3-champ sont vraiment non-linéaires.*

◇

PREUVE.

On rappelle que le caractère linéairement dégénéré ou vraiment non-linéaire d'un champ est donné par la variation de la vitesse caractéristique λ_k le long de la courbe d'onde. La courbe d'onde étant en tout point parallèle au vecteur propre correspondant \mathbf{r}_k de la jacobienne, on étudie le produit $(\nabla \lambda_k)^t \cdot \mathbf{r}_k$, $k = 1, 2, 3$:

$$\begin{aligned} (\nabla \lambda_1)^t \cdot \mathbf{r}_1 &= \frac{\tau^2}{2c} \frac{\partial^2 P}{\partial \tau^2} \Big|_s = -\frac{\tau^2}{2c} \varepsilon_{\tau\tau\tau}^{\text{eq}}, \\ (\nabla \lambda_2)^t \cdot \mathbf{r}_2 &= 0, \\ (\nabla \lambda_3)^t \cdot \mathbf{r}_3 &= -\frac{\tau^2}{2c} \frac{\partial^2 P}{\partial \tau^2} \Big|_s = \frac{\tau^2}{2c} \varepsilon_{\tau\tau\tau}^{\text{eq}}. \end{aligned}$$

On voit que

- ☛ le 2-champ est toujours linéairement dégénéré,
- ☛ les 1-champ et 3-champ sont
 - vraiment non linéaires si $\varepsilon_{\tau\tau\tau}^{\text{eq}} \neq 0$,
 - linéairement dégénérés si $\varepsilon_{\tau\tau\tau}^{\text{eq}} = 0$.

Puisqu'on a fait les hypothèse 3.1 à la page 89 et 3.2 à la page 90, alors $\varepsilon_{\tau\tau\tau}^{\text{eq}} < 0$: les 1-champ et 3-champ sont toujours vraiment non linéaires. ♦

4.2.2. Existence et unicité des solutions du problème de Riemann

☞ DÉFINITION 4.2. Un *k-choc* est admissible au sens de Lax s'il vérifie

$$\begin{cases} \lambda_k(\mathbf{V}_r) < \sigma(\mathbf{V}_\ell, \mathbf{V}_r) < \lambda_k(\mathbf{V}_\ell) \\ \lambda_{k-1}(\mathbf{V}_\ell) < \sigma(\mathbf{V}_\ell, \mathbf{V}_r) < \lambda_{k+1}(\mathbf{V}_r) \end{cases} \quad (4.1)$$

où $\sigma(\mathbf{V}_\ell, \mathbf{V}_r)$ est la vitesse du choc.

On appelle solution de Liu une solution entropique qui vérifie

$$\sigma(\mathbf{V}_\ell, \mathbf{V}_r) \leq \sigma(\mathbf{V}_\ell, \mathbf{V}) \quad \forall \mathbf{V} \in \mathcal{S}_k(\mathbf{V}_\ell, \mathbf{V}_r) \quad (4.2)$$

où $\mathcal{S}_k(\mathbf{V}_\ell, \mathbf{V}_r)$ est la courbe de choc qui relie \mathbf{V}_ℓ à \mathbf{V}_r .

Il est bien connu que toute solution de Liu est aussi solution de Lax (Liu [74]).

Pour un système hyperbolique de m lois de conservation, la solution du problème de Riemann peut généralement être construite en considérant les courbes d'onde W_k de ce système. Ces courbes peuvent être paramétrées par la donnée d'un état V de l'espace des phases par lequel elles passent et par un réel ξ : $W_k(V, \xi)$. Pour une donnée initiale constante par morceaux V_ℓ, V_r , la solution du problème de Riemann est alors obtenue si les états V_ℓ et V_r sont joignables en passant par les m courbes d'onde ordonnées, c'est à dire s'il existe des paramètres ξ_k , $k = 1, \dots, m$ tels qu'en définissant

$$V_0 = V_\ell,$$

et pour $k = 1, \dots, m$

$$V_k = W_k(V_{k-1}, \xi_k),$$

alors on ait

$$V_m = W_m(\dots W_2(W_1(V_\ell, \xi_1), \xi_2), \dots, \xi_m) = V_r.$$

La solution correspond alors à la juxtaposition des états constants V_k séparés par des ondes décrites au travers des courbes W_k (détentes, chocs, discontinuités de contact). Le point crucial de cette résolution est de trouver les états V_k , c'est à dire les m paramètres ξ_k .

Considérons le problème de Riemann pour un système d'Euler fermé par une loi d'état $(\tau, \varepsilon) \mapsto P$ quelconque (soit dans une phase pure soit dans le mélange à l'équilibre, mais pas entre les deux). Alors

☆**THÉORÈME 4.1 (LIU (74, p.228)) :**

Si $(\tau, \varepsilon) \mapsto P$ est telle que

$$\left. \frac{\partial P}{\partial \tau} \right|_\varepsilon < 0 \quad \text{et} \quad \left. \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} \right|_\tau > 0 \quad (4.3)$$

alors il existe au plus une solution de Liu au problème de Riemann. ◇

Si on considère la loi d'état de changement de phase $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$ (resp. $(\tau, s) \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$), les deux conditions sont trivialement vérifiées pour les états monophasiques.

De plus pour les états de mélange à l'équilibre on a les inégalités suivantes (cf. théorème 3.1 à la page 79)

$$s_{\tau\tau}^{\text{eq}} < 0, \quad s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} < 0, \quad s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}} > 0.$$

Donc on obtient

$$\left. \frac{\partial P}{\partial \tau} \right|_\varepsilon = \frac{s_{\tau\tau}^{\text{eq}} s_\varepsilon^{\text{eq}} - s_\tau^{\text{eq}} s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}}}{(s_\varepsilon^{\text{eq}})^2} < 0, \quad \left. \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} \right|_\tau = \frac{s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}} s_\varepsilon^{\text{eq}} - s_\tau^{\text{eq}} s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}}}{(s_\varepsilon^{\text{eq}})^2} > 0,$$

d'où l'unicité.

Toujours à propos des solutions de Liu, le théorème suivant porte sur la croissance de l'entropie dans les chocs :

☆**THÉORÈME 4.2 (LIU (74, p.233)) :**

Si $(\tau, s) \mapsto P$ est telle que

$$\left. \frac{\partial P}{\partial s} \right|_\tau < 0 \quad (4.4)$$

alors s croît à travers chaque choc qui vérifie (4.2). ◇

Il est simple de vérifier que (4.4) est satisfaite dans le mélange et dans les phases pures. C'est une conséquence directe du théorème 3.3 à la page 87 pour le mélange et de la proposition 3.7 à la page 103 pour les phases pures.

4.3. Problème de Riemann avec traversée de la courbe de saturation

S'il existe une littérature abondante sur les solutions du problème de Riemann associé au système d'Euler lorsque la loi d'état représente une phase pure, ce n'est pas le cas lorsque l'on est en présence d'un changement de phase. L'ouvrage de référence pour ce problème est l'article de Menikoff et Plohr [80] où les deux auteurs montrent qu'il n'y a pas unicité des solutions de Lax. Depuis, beaucoup d'auteurs ont approfondi la question, citons notamment Fan [36], Heuzé [50], Jaouen [58; 58], Müller et Voß [81], Voß [96].

Plusieurs critères ont ainsi été introduits dans la littérature afin de sélectionner la solution physique (citons par exemple le critère «visco-capillaire», le critère «capillaire», le «critère de viscosité», la liste n'étant pas exhaustive) mais il n'y a pas consensus. Un des critères les plus utilisés dans le cas de la nucléation d'une bulle est le critère de Liu.

La première question qu'il est naturel de se poser est celle de la stricte hyperbolicité du système pour la loi de changement de phase $P = P^{eq}$. À cette question on a déjà répondu par l'affirmative au chapitre précédent. En ce qui concerne les systèmes de lois de conservation avec flux continu mais pas de classe \mathcal{C}^1 , rappelons que la définition de leurs solutions faibles pose problème. La discontinuité de la dérivée de cette loi nécessite aussi une définition plus générale de la notion d'hyperbolicité. Pour un étude approfondie de ce problème on renvoie à l'article de Correia, LeFloch et Thanh [28]. Cette définition est en effet celle utilisée par Voß [96, p. 73] pour un problème de changement de phase avec une loi d'état de type Van der Waals.

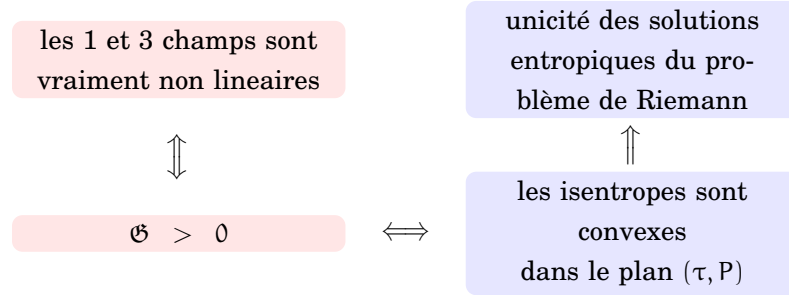
Ensuite on s'intéresse à l'existence et à l'unicité des solutions du problème de Riemann lorsque les états initiaux n'appartiennent pas à la même zone. Cette question est très complexe et on donne ici juste les points clés de la problématique.

Considérons un fluide monphasique munit d'une loi d'état qui, pour certains états, ne vérifie pas l'hypothèse 3.2 à la page 90 ; cette loi d'état est telle que les isentropes changent de concavité ou elles deviennent linéaires. Cela entraîne une perte d'unicité des solutions entropiques, comme cela est fortement souligné par Menikoff et Plohr [80], Müller et Voß [81], Voß [96]. Dans ce cas, puisque la loi d'état est de classe \mathcal{C}^∞ , cette perte de convexité peut être «mesurée» par la *dérivée fondamentale* introduite à la définition 3.3 à la page 90 :

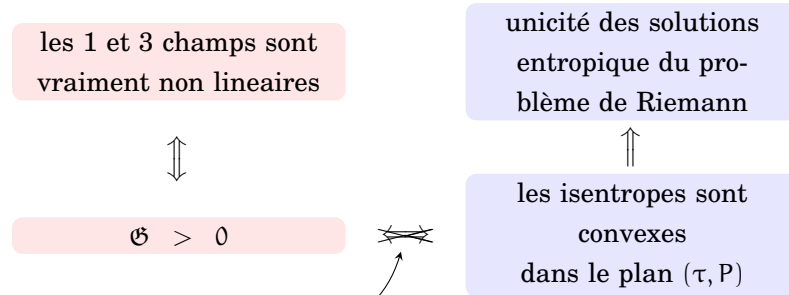
$$\mathfrak{G} \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\tau}{2} \frac{\varepsilon_{\tau\tau\tau}}{\varepsilon_{\tau\tau}}.$$


Puisque $-\frac{\tau}{2} \frac{1}{\varepsilon_{\tau\tau}} < 0$, alors $\text{sgn}(\mathfrak{G}) = -\text{sgn}(\varepsilon_{\tau\tau\tau})$ et on voit que \mathfrak{G} devient négative si et seulement si les isentropes perdent leur convexité.

Puisque le signe de \mathfrak{G} est lié aux 1-champ et 3-champ, pour les états où cette quantité est définie on a



Le problème de l'utilisation de la loi de changement de phase est que la dérivée fondamentale (de même que les champs) *n'est pas définie le long de la courbe de saturation* :



Or, non seulement l'implication  n'est plus valable mais, comme on l'a remarqué au chapitre précédent, les courbes isentropes sont vraiment non convexes lorsqu'elles traversent la branche droite de la courbe de saturation (courbe de rosée). Ceci implique que le flux n'est pas convexe et donc qu'il n'y a pas d'unicité des solutions entropiques du problème de Riemann (voir de nouveau Jaouen [58], Menikoff et Plohr [80], Voß [96]).

Comme observé dans l'annexe 3.A à la page 109, le changement de concavité des isentropes peut apparaître en dehors du dôme de saturation. Donc la perte d'unicité des solutions entropiques due à la perte de convexité globale des isentropes n'est pas un phénomène qu'on rencontre seulement avec le changement de phase. Il existe en effet des fluides, dits «rétrogrades», qui ont une loi d'état de classe \mathcal{C}^∞ , tels que \mathcal{G} devient négative pour certains états. Une étude du problème de Riemann pour ces fluides a été réalisée par Heuzé [50], Menikoff et Plohr [80], Müller et Voß [81], Voß [96].

4.3.1. Existence et unicité des solutions du problème de Riemann

Concrètement, on a deux types de difficultés lorsqu'on considère le problème de Riemann avec le changement de phase :

1. une perte de régularité à la traversée des courbes d'ébullition et de rosée,
2. une perte de convexité des courbes isentropes à la traversée de la courbe de rosée.

Si la première difficulté trouve une réponse dans l'article de Correia *et al.* [28], la seconde difficulté subsiste. Sans rentrer dans les détails rappelons juste ce résultat de non unicité des solutions avec le critère usuel de Lax :

☆ **THÉORÈME 4.3 (MENIKOFF ET PLOHR (80)):**

Le problème de Riemann associé au système 3.5 à la page 84 admet un continuum de solutions vérifiant les conditions de Lax (4.1). ◇

Pour choisir la solution physique il est nécessaire d'introduire d'autres critères d'admissibilité (souvent appelés «relations cinétiques»). Parmi ces critères, le plus utilisé est la «condition de Liu» (4.2) qui est l'unique solution qui admet un profil de viscosité. En effet, c'est le critère choisi par Voß [96] et par Jaouen [58] pour définir la «solution physique». On en rappelle la définition :

☞ **DÉFINITION 4.3 (CRITÈRE DE VISCOSITÉ).** *Considérons un système de lois de conservation écrit en variables lagrangiennes*

$$D_t \mathbf{V} + \partial_m \mathbf{F}(\mathbf{V}) = \mathbf{0} \quad (4.5)$$

où $\mathbf{V} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, u, P)^t$ et $\mathbf{F}(\mathbf{V}) \stackrel{\text{def}}{=} (-u, P, Pu)^t$. *Considérons ce système comme une approximation d'une équation de la forme*

$$D_t \mathbf{V}_\omega + \partial_m \mathbf{F}(\mathbf{V}_\omega) = \omega \partial_m (A(\mathbf{V}_\omega) \partial_m (\mathbf{V}_\omega)) \quad (4.6)$$

lorsque ω tend vers zéro, $A(\mathbf{V})$ étant un tenseur de diffusion qui modélise certains phénomènes physiques négligés dans (4.5).

Le critère de viscosité affirme que les solutions physiques de (4.5) sont les limites des solutions de (4.6), notamment que les ondes de choc solutions de (4.5) sont associées à des ondes progressives solutions de (4.6) (Serre [91]).

4.4. Conclusion

Au chapitre précédent on a prouvé la stricte hyperbolicité du système des équations d'Euler muni de la loi d'état de changement de phase à l'équilibre. La construction décrite et la stricte hyperbolicité du système des équations d'Euler sont valables pour une très large classe de lois d'état car, outre une hypothèse de régularité, les seuls hypothèses nécessaires sont celles qui qualifient classiquement la stabilité d'un corps pur homogène. Malgré la stricte hyperbolicité du système, on a vu que le problème de Riemann reste mal-posé : l'unicité est perdue dans l'ensemble classique des solutions entropiques. Cependant on a vérifié qu'une seule des solutions entropiques satisfait la condition de Liu et ce sera cette solution qu'on cherchera à approcher numériquement dans la deuxième partie. Ce résultat est un pas vers l'étude des systèmes de fluides compressibles non visqueux avec changement de phase car il constitue une base solide pour la simulation des phénomènes de changement de phase et aidera à la construction de solveurs numériques (on renvoie par exemple à Barberon [9], Barberon et Helluy [10], Caro [21], Caro *et al.* [23; 24], Helluy [46], Helluy et Seguin [48], Le Métayer *et al.* [67] etc., la liste n'étant pas exhaustive).

CHAPITRE 5

Gaz Parfaits

5.1 Introduction	122
5.2 Notations et position du problème	123
5.3 Loi d'état de changement de phase	128
5.3.1 Courbe de coexistence	132
5.3.2 Propriété de la loi de changement de phase	134
5.4 Hydrodynamique	143
5.5 Conclusion.	145
Annexes	145
5.A Cas limites avec l'équation des gaz parfaits	145
5.A.1 Calcul de la loi de changement de phase	146
5.A.2 Propriétés de la loi de changement de phase	149
5.B Récapitulatif pour les gaz parfaits	154

Résumé

NOUS VENONS DE VOIR comment construire un modèle de transition de phase : la donnée de la fonction $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ constituant une équation d'état complète, il suffit de se donner une entropie $\mathbf{w}_\alpha \mapsto s_\alpha$ pour chaque phase $\alpha = 1, 2$ et de les raccorder en utilisant les équations de l'équilibre entre les deux phases, à savoir $(P, T, g)_1 = (P, T, g)_2$. Afin d'illustrer cette démarche nous construisons à présent un modèle explicite de loi d'état à saturation.

On considère un fluide susceptible d'exister sous deux phases, chacune étant modélisée par une équation d'état de type «gaz parfait polytropique». La loi d'état de changement de phase est déterminée en résolvant l'équation de changement de phase de la définition 2.10 à la page 55 qui définit l'équilibre entre les deux phases. On obtient ainsi l'équation d'état complète $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$.

On sait que ce type de loi d'état ne décrit pas de façon satisfaisante les propriétés thermodynamiques des fluides (surtout la phase liquide). Toutefois, le fait de considérer que chaque phase suit une loi de type gaz parfait a un intérêt majeur : la détermination de la loi de changement de phase se réduit à la recherche (numérique) de l'unique racine d'une fonction polynomiale (à exposant réel) permettant ainsi une vérification directe des propriétés de cette loi, notamment la stricte hyperbolicité du système des équations d'Euler.

5.1. Introduction

Pour $\alpha = 1, 2$ soient $\mathbf{w}_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} (\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha)$ des états thermodynamiques monophasiques et $\mathbf{w}_\alpha \mapsto s_\alpha$ deux lois d'état complètes. À partir de ces fonctions on définit la température T_α , la pression P_α et l'enthalpie libre (ou potentiel de Gibbs) g_α ainsi :

$$\frac{1}{T_\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial s_\alpha}{\partial \varepsilon_\alpha} \right|_{\tau_\alpha}, \quad P_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} T_\alpha \left. \frac{\partial s_\alpha}{\partial \tau_\alpha} \right|_{\varepsilon_\alpha}, \quad g_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_\alpha + P_\alpha \tau_\alpha - T_\alpha s_\alpha.$$

Rappelons la construction de la loi d'état de changement de phase ; elle est basée sur l'équilibre thermodynamique d'un fluide entre sa phase liquide et sa phase vapeur. Si on choisit comme variables le volume et l'énergie interne, cette loi s'écrit sous la forme $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$ et elle est ainsi définie : pour tout couple $(\tau, \varepsilon) \in \mathcal{C}$,

- ❶ si $(\tau_{\text{liq}}^*, \varepsilon_{\text{liq}}^*, \tau_{\text{vap}}^*, \varepsilon_{\text{vap}}^*, y^*)$ est solution du système

$$\begin{cases} P_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = P_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) \\ T_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = T_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) \\ g_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = g_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) \\ \varepsilon = y \varepsilon_{\text{liq}} + (1 - y) \varepsilon_{\text{vap}} \\ \tau = y \tau_{\text{liq}} + (1 - y) \tau_{\text{vap}} \end{cases}$$

et $y^* \in]0, 1[$ alors on pose

$$s^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = y^* s_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}^*, \varepsilon_{\text{liq}}^*) + (1 - y^*) s_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}^*, \varepsilon_{\text{vap}}^*)$$

- ❷ si le système (2.32) n'a pas de solution ou bien s'il y a des solutions mais y^* n'est pas dans l'ouvert $]0, 1[$ alors l'état (τ, ε) est un état monophasique et on choisit à quelle phase il appartient selon la règle suivante :

- ① si $s_{\text{liq}}(\tau, \varepsilon) > s_{\text{vap}}(\tau, \varepsilon)$ alors on pose $y^* = 1$, $\tau_{\text{liq}}^* = \tau$, $\varepsilon_{\text{liq}}^* = \varepsilon$ et

$$s^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = s_{\text{liq}}(\tau, \varepsilon),$$

(les valeurs de τ_{vap}^* et $\varepsilon_{\text{vap}}^*$ sont quelconques) ;

② si $s_{\text{liq}}(\tau, \varepsilon) < s_{\text{vap}}(\tau, \varepsilon)$ alors on pose $y^* = 0$, $\tau_{\text{vap}}^* = \tau$, $\varepsilon_{\text{vap}}^* = \varepsilon$ et

$$s^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = s_{\text{vap}}(\tau, \varepsilon),$$

(les valeurs de τ_{liq}^* et $\varepsilon_{\text{liq}}^*$ sont quelconques).

5.2. Notations et position du problème

Considérons donc deux phases ($\alpha = 1, 2$) suivant chacune une loi d'état de type «gaz parfait polytropique» (i.e. un gaz parfait pour lequel la chaleur molaire à volume constant c_v est constante). La célèbre loi des gaz parfaits exprime le fait que le produit du volume molaire et de la pression est proportionnel à la température, la constante de multiplicité étant traditionnellement notée r et appelée «constante des gaz parfaits»

$$P\tau = rT.$$

Cette loi découle de la loi complète ainsi définie : soient $\gamma_\alpha > 1$ et $c_{v_\alpha} > 0$ des constantes dépendant seulement du fluide. Les équations d'état complètes pour les deux phases s'écrivent

$$\begin{aligned} (\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \mapsto s_\alpha &\stackrel{\text{def}}{=} c_{v_\alpha} \ln \left(\frac{\varepsilon_\alpha}{\widehat{\varepsilon}_\alpha} \left(\frac{\tau_\alpha}{\widehat{\tau}_\alpha} \right)^{\gamma_\alpha - 1} \right) = \\ &= c_{v_\alpha} \log(\varepsilon_\alpha \tau_\alpha^{\gamma_\alpha - 1}) + \widehat{s}_\alpha, \quad \text{avec } \widehat{s}_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} -c_{v_\alpha} \log(\widehat{\varepsilon}_\alpha \widehat{\tau}_\alpha^{\gamma_\alpha - 1}), \end{aligned}$$

les constantes $\widehat{\varepsilon}_\alpha$ et $\widehat{\tau}_\alpha$ représentant l'état thermodynamique de référence et étant mesurées à partir de la même échelle de température. On définit la température T_α , la pression P_α et l'enthalpie libre (ou potentiel de Gibbs) g_α classiquement comme

$$\frac{1}{T_\alpha(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha)} \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial s_\alpha}{\partial \varepsilon_\alpha} \right|_{\tau_\alpha} = \frac{c_{v_\alpha}}{\varepsilon_\alpha}, \quad (5.1)$$

$$P_\alpha(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \stackrel{\text{def}}{=} T_\alpha \left. \frac{\partial s_\alpha}{\partial \tau_\alpha} \right|_{\varepsilon_\alpha} = (\gamma_\alpha - 1) \frac{\varepsilon_\alpha}{\tau_\alpha}, \quad (5.2)$$

$$\begin{aligned} g_\alpha(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) &\stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_\alpha + P_\alpha \tau_\alpha - T_\alpha s_\alpha = \varepsilon_\alpha \left[\gamma_\alpha - \ln \left(\frac{\varepsilon_\alpha}{\widehat{\varepsilon}_\alpha} \left(\frac{\tau_\alpha}{\widehat{\tau}_\alpha} \right)^{\gamma_\alpha - 1} \right) \right] = \\ &= \varepsilon_\alpha [\gamma_\alpha - \ln(\varepsilon_\alpha \tau_\alpha^{\gamma_\alpha - 1})] - T \widehat{s}_\alpha. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Vérifions que cette équation vérifie bien les hypothèses données aux chapitres 2 et 3 :

☞ hypothèse de monotonie (2.3) : la température et la pression sont strictement positives car

$$c_{v_\alpha} > 0 \quad \text{et} \quad \gamma_\alpha > 1;$$

☞ hypothèse (2.1) : puisque $c_{v_\alpha} > 0$ et $\gamma_\alpha > 1$, alors

$$\lim_{\substack{\tau_\alpha \rightarrow 0 \\ \varepsilon_\alpha > 0}} s_\alpha(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) = \lim_{\substack{\varepsilon_\alpha \rightarrow 0 \\ \tau_\alpha > 0}} s_\alpha(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) = -\infty;$$

☞ hypothèse de concavité (2.4) : la matrice hessienne d^2s_α est définie strictement négative dans le cône $\mathcal{C}_\alpha \stackrel{\text{déf}}{=} \{\tau_\alpha > 0, \varepsilon_\alpha > 0\}$ car il suffit de vérifier que

$$\begin{cases} (s_\alpha)_{\varepsilon_\alpha \varepsilon_\alpha} < 0 & (\text{équiv. } (s_\alpha)_{\tau_\alpha \tau_\alpha} < 0), \\ (s_\alpha)_{\varepsilon_\alpha \varepsilon_\alpha} (s_\alpha)_{\tau_\alpha \tau_\alpha} > (s_\alpha)_{\tau_\alpha \varepsilon_\alpha}^2. \end{cases}$$

Puisque

$$\begin{cases} (s_\alpha)_{\varepsilon_\alpha \varepsilon_\alpha} = -\frac{c_{v\alpha}}{\varepsilon_\alpha^2}, \\ (s_\alpha)_{\tau_\alpha \tau_\alpha} = -\frac{c_{v\alpha}(\gamma_\alpha - 1)}{\tau_\alpha^2}, \\ (s_\alpha)_{\tau_\alpha \varepsilon_\alpha} = 0, \end{cases}$$

ceci est vrai car

$$c_{v\alpha} > 0 \quad \text{et} \quad \gamma_\alpha > 1;$$

☞ hypothèse (3.1) : les courbes isentropes ne s'intersectent pas car il suffit de vérifier que $(\varepsilon_\alpha)_{\tau_\alpha s_\alpha}$ est négatif. Or

$$\varepsilon_\alpha = \tau_\alpha^{1-\gamma_\alpha} \exp\left(\frac{s_\alpha - \hat{s}_\alpha}{c_{v\alpha}}\right)$$

donc

$$(\varepsilon_\alpha)_{\tau_\alpha s_\alpha} = -\frac{\gamma_\alpha - 1}{c_{v\alpha}} \tau_\alpha^{-\gamma_\alpha} \exp\left(\frac{s_\alpha - \hat{s}_\alpha}{c_{v\alpha}}\right) < 0;$$

☞ hypothèse (3.2) : la dérivée fondamentale \mathfrak{G}_α est positive car

$$\begin{aligned} (\varepsilon_\alpha)_{\tau_\alpha \tau_\alpha} &= \exp\left(\frac{s_\alpha - \hat{s}_\alpha}{c_{v\alpha}}\right) (\gamma_\alpha - 1) \gamma_\alpha \tau_\alpha^{-(\gamma_\alpha+1)} > 0, \\ (\varepsilon_\alpha)_{\tau_\alpha \tau_\alpha \tau_\alpha} &= -\exp\left(\frac{s_\alpha - \hat{s}_\alpha}{c_{v\alpha}}\right) (\gamma_\alpha + 1) (\gamma_\alpha - 1) \gamma_\alpha \tau_\alpha^{-(\gamma_\alpha+2)} < 0, \\ \mathfrak{G}_\alpha &= -\frac{\tau}{2} \frac{(\varepsilon_\alpha)_{\tau_\alpha \tau_\alpha \tau_\alpha}}{(\varepsilon_\alpha)_{\tau_\alpha \tau_\alpha}} = \frac{\gamma_\alpha + 1}{2} > 0. \end{aligned}$$

On vérifie enfin que le carré de la vitesse du son c^* est positif :

$$(c_\alpha^*)^2 \stackrel{\text{déf}}{=} \frac{\frac{\partial P_\alpha}{\partial \tau_\alpha} \Big|_{s_\alpha}}{\tau_\alpha^2} = -\frac{\varepsilon_{\tau\tau}}{\tau_\alpha^2} = \tau_\alpha^2 \left(P_\alpha \frac{\partial P_\alpha}{\partial \varepsilon_\alpha} \Big|_{\tau_\alpha} - \frac{\partial P_\alpha}{\partial \tau_\alpha} \Big|_{\varepsilon_\alpha} \right) = \gamma_\alpha (\gamma_\alpha - 1) \varepsilon_\alpha > 0.$$

★ **REMARQUE 5.1.** On remarque que γ_α coïncide avec la définition de l'exposant adiabatique de la définition 3.2 à la page 88. Un simple calcul montre aussi que le coefficient de Grüneisen est $\Gamma_\alpha = \gamma_\alpha - 1$ et que la chaleur spécifique adimensionnée s'écrit $g_\alpha = -\frac{\gamma_\alpha - 1}{\tau_\alpha}$. ❀

En éliminant y^* , la construction de la loi d'état à saturation devient :

pour tout $\mathbf{w} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, \varepsilon) \in \mathcal{C} \stackrel{\text{def}}{=} \{\tau > 0, \varepsilon > 0\}$, chercher le quadruple $(\tau_1^*, \tau_2^*, \varepsilon_1^*, \varepsilon_2^*)$ qui vérifie

$$\begin{cases} \varepsilon_1/c_{v1} = \varepsilon_2/c_{v2}, \end{cases} \quad (5.4a)$$

$$\begin{cases} \Gamma_1 c_{v1}/\tau_1 = \Gamma_2 c_{v2}/\tau_2, \end{cases} \quad (5.4b)$$

$$\begin{cases} \varepsilon_1 \left[\ln \left(\frac{\varepsilon_1}{\widehat{\varepsilon}_1} \left(\frac{\tau_1}{\widehat{\tau}_1} \right)^{\Gamma_1} \right) - \gamma_1 \right] = \varepsilon_2 \left[\ln \left(\frac{\varepsilon_2}{\widehat{\varepsilon}_2} \left(\frac{\tau_2}{\widehat{\tau}_2} \right)^{\Gamma_2} \right) - \gamma_2 \right], \end{cases} \quad (5.4c)$$

avec la contrainte

$$\frac{\tau - \tau_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_2^*}{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}.$$

On va maintenant calculer explicitement la solution du système (5.4) (rappelons qu'au théorème 2.1 à la page 52 on a prouvé l'existence et l'unicité d'une telle solution).

Transition de phase liquide-vapeur Le modèle qu'on a établi dans les chapitres précédents est valable pour des transitions de phase du premier ordre, c'est-à-dire pour des transitions qui vérifient l'hypothèse 2.5 à la page 49. Pour les gaz parfaits cela donne la proposition suivante :

► **PROPOSITION 5.1:**

Pour $\alpha = 1, 2$ soient $(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \mapsto s_\alpha = c_{v\alpha} \log(\varepsilon_\alpha \tau_\alpha^{\gamma_\alpha - 1}) + \widehat{s}_\alpha$ les équations d'état du liquide et de sa vapeur. Si le changement de phase est du premier ordre (au sens de la propriété de page 34) alors

$$c_{v1} \neq c_{v2}, \quad c_{v1} \Gamma_1 \neq c_{v2} \Gamma_2, \quad c_{v1} \gamma_1 \neq c_{v2} \gamma_2. \quad \diamond$$

PREUVE.

Soit $(\tau_1^*, \tau_2^*, \varepsilon_1^*, \varepsilon_2^*)$ la solution du système (5.4). La condition 2.5 à la page 49 affirme que si un changement de phase est du premier ordre alors

$$\Delta \varepsilon_\alpha^* \neq 0, \quad \Delta \tau_\alpha^* \neq 0, \quad \Delta s_\alpha^* \neq 0,$$

où $\Delta \star_\alpha^* \stackrel{\text{def}}{=} \star_1^* - \star_2^*$.

Puisque le long de la courbe de coexistence $(\frac{1}{T}, \frac{P}{T}, \frac{g}{T})_1 = (\frac{1}{T}, \frac{P}{T}, \frac{g}{T})_2$, on a

- i) $s_1^* = s_2^* \text{ ssi } \varepsilon_1^* + P\tau_1^* = \varepsilon_2^* + P\tau_2^* \text{ ssi } c_{v1}T + c_{v1}\Gamma_1T = c_{v2}T + c_{v2}\Gamma_2T \text{ ssi } c_{v1}\gamma_1 = c_{v2}\gamma_2,$
- ii) $\tau_1^* = \tau_2^* \text{ ssi } c_{v1}\Gamma_1\frac{T}{P} = c_{v2}\Gamma_2\frac{T}{P} \text{ ssi } c_{v1}\Gamma_1 = c_{v2}\Gamma_2,$
- iii) $\varepsilon_1^* = \varepsilon_2^* \text{ ssi } c_{v1}T = c_{v2}T \text{ ssi } c_{v1} = c_{v2}.$

Donc

- i) $\Delta s_\alpha^* \neq 0 \text{ ssi } c_{v1}\gamma_1 \neq c_{v2}\gamma_2,$
- ii) $\Delta \tau_\alpha^* \neq 0 \text{ ssi } c_{v1}\Gamma_1 \neq c_{v2}\Gamma_2,$
- iii) $\Delta \varepsilon_\alpha^* \neq 0 \text{ ssi } c_{v1} \neq c_{v2}.$

ce qui conclut la preuve. ♦

Il y a quatre cas possibles qui sont :

Cas ❶ $c_{v_1} = c_{v_2}, \gamma_1 \neq \gamma_2 \Leftrightarrow \Delta\varepsilon^* = 0, \Delta\tau^* \neq 0, \Delta s^* \neq 0;$

Cas ❷ $c_{v_1} \neq c_{v_2}, c_{v_1}\Gamma_1 = c_{v_2}\Gamma_2 \Leftrightarrow \Delta\varepsilon^* \neq 0, \Delta\tau^* = 0, \Delta s^* \neq 0;$

Cas ❸ $c_{v_1} \neq c_{v_2}, c_{v_1}\gamma_1 = c_{v_2}\gamma_2 \Leftrightarrow \Delta\varepsilon^* \neq 0, \Delta\tau^* \neq 0, \Delta s^* = 0;$

Cas ❹ $c_{v_1} \neq c_{v_2}, c_{v_1}\Gamma_1 \neq c_{v_2}\Gamma_2 \text{ et } c_{v_1}\gamma_1 \neq c_{v_2}\gamma_2 \Leftrightarrow \Delta\varepsilon^* \neq 0, \Delta\tau^* \neq 0, \Delta s^* \neq 0.$

On voit alors que pour représenter un changement de phase du premier ordre il faut que les coefficients des deux lois d'états soient comme en ❹.¹

Conditions de vraisemblance physique Le fait que les deux lois d'état correspondent à deux phases d'un même fluide impose des contraintes sur les paramètres caractérisant ces lois. Notamment, pour des raisons physiques, il faut que, à saturation, $\tau^{\text{liq}} < \tau^{\text{vap}}$ et $\varepsilon^{\text{liq}} < \varepsilon^{\text{vap}}$. On a alors la proposition suivante.

► **PROPOSITION 5.2 (CONDITIONS DE COMPATIBILITÉ):**

Soient $(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \mapsto s_\alpha = c_{v_\alpha} \log(\varepsilon_\alpha \tau_\alpha^{\gamma_\alpha - 1}) + \hat{s}_\alpha$ ($\alpha = \text{liq ou vap}$), les lois d'état des phases liquide et vapeur d'un même fluide. Alors les conditions $\tau_{\text{liq}}^* < \tau_{\text{vap}}^*$ et $\varepsilon_{\text{liq}}^* < \varepsilon_{\text{vap}}^*$ sont équivalentes à

$$\Gamma^{\text{liq}} c_v^{\text{liq}} < \Gamma^{\text{vap}} c_v^{\text{vap}} \quad \text{et} \quad c_v^{\text{liq}} < c_v^{\text{vap}}. \quad \diamond$$

PREUVE.

À la saturation on a $(P, T, g)^{\text{vap}} = (P, T, g)^{\text{liq}}$, donc

$$1 > \frac{\tau^{\text{liq}}}{\tau^{\text{vap}}} = \frac{\Gamma^{\text{liq}} c_v^{\text{liq}}}{\Gamma^{\text{vap}} c_v^{\text{vap}}} \quad \text{et} \quad 1 > \frac{\varepsilon^{\text{liq}}}{\varepsilon^{\text{vap}}} = \frac{c_v^{\text{liq}}}{c_v^{\text{vap}}}$$

qui concluent la preuve. \blacklozenge

★ **REMARQUE 5.2.** On vérifie que $s^{\text{liq}} < s^{\text{vap}}$ car on sait que les entropies sont des fonctions strictement croissantes de (τ, ε) .

En effet puisqu'à la saturation $(P, T, g)^{\text{vap}} = (P, T, g)^{\text{liq}}$, en notant

$$(P, T, g)^{\text{liq ou vap}} \stackrel{\text{def}}{=} (\bar{P}, \bar{T}, \bar{g}),$$

on a

$$s_\alpha = \frac{\varepsilon_\alpha + \bar{P}\tau_\alpha - \bar{g}}{\bar{T}}$$

et donc

$$\text{sgn}(s^{\text{liq}} - s^{\text{vap}}) = \text{sgn}(\varepsilon^{\text{liq}} + \bar{P}\tau^{\text{liq}} - \varepsilon^{\text{vap}} - \bar{P}\tau^{\text{vap}}) = \text{sgn}(c_v^{\text{liq}} - c_v^{\text{vap}} + \Gamma^{\text{liq}} c_v^{\text{liq}} - \Gamma^{\text{vap}} c_v^{\text{vap}}) < 0.$$

On obtient $\gamma^{\text{liq}} c_v^{\text{liq}} - \gamma^{\text{vap}} c_v^{\text{vap}} < c_v^{\text{liq}} - c_v^{\text{vap}} < 0$. \clubsuit

¹Même si ❶, ❷ et ❸ ne rentrent pas dans le cadre des transitions de phase du premier ordre, on étudiera ces cas «limites» dans l'annexe à la page 145.

Conditions acoustiques Au paragraphe précédent on a donné la traduction pour deux gaz parfaits de l'hypothèse 2.5 à la page 49. Toutefois, même si ces conditions sont suffisantes pour la construction de la loi à saturation, il est toutefois intéressant d'établir une condition supplémentaire liée à la vitesse du son des deux phases. Rappelons d'abord que la vitesse du son d'une phase pure pour un gaz parfait polytropique peut être écrite comme $c = \sqrt{\gamma \Gamma c_v T}$. Pour des raisons de vraisemblance physiques, il faut que la vitesse du son dans le liquide soit supérieure à la vitesse du son dans sa vapeur, ce qui implique

$$\gamma^{\text{liq}} \Gamma^{\text{liq}} c_v^{\text{liq}} > \gamma^{\text{vap}} \Gamma^{\text{vap}} c_v^{\text{vap}}. \quad (5.5)$$

On remarque que les deux contraintes de la proposition 5.2 à la page ci-contre avec la condition (5.5) donnent $\gamma^{\text{liq}} > \gamma^{\text{vap}}$.

En résumé :

Conditions de vraisemblance physique

Pour que deux lois de type gaz parfait polytropique puissent représenter les deux phases liquide et vapeur d'un fluide il faut que les quatre paramètres c_v^{liq} , c_v^{vap} , γ^{liq} et γ^{vap} respectent les trois contraintes suivantes :

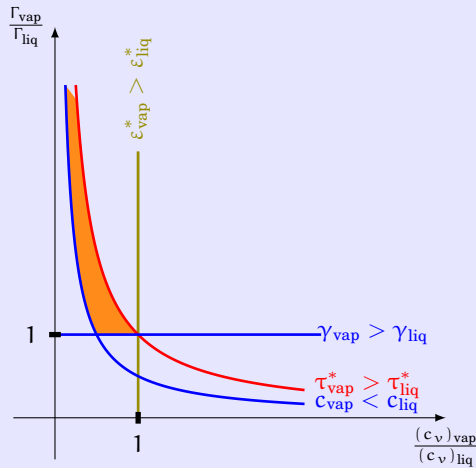
CC (condition de compatibilité)

$$\begin{cases} \Gamma^{\text{liq}} c_v^{\text{liq}} < \Gamma^{\text{vap}} c_v^{\text{vap}}, & (5.6a) \\ c_v^{\text{liq}} < c_v^{\text{vap}}, & (5.6b) \end{cases}$$

CA (condition acoustique)

$$\gamma^{\text{liq}} \Gamma^{\text{liq}} c_v^{\text{liq}} > \gamma^{\text{vap}} \Gamma^{\text{vap}} c_v^{\text{vap}}. \quad (5.7)$$

La partie colorée de la figure suivante correspond à la zone admissible pour les paramètres c_v^{liq} , c_v^{vap} , γ^{liq} et γ^{vap} sous contraintes CC (5.6) et CA (5.7).



Dans la suite, si non explicitement dit, on supposera que les conditions CC (5.6) et

CA (5.7) sont vérifiées. On rappelle qu'elles impliquent les inégalités

$$\begin{cases} \gamma^{\text{liq}} c_v^{\text{liq}} < \gamma^{\text{vap}} c_v^{\text{vap}}, \\ \gamma^{\text{liq}} > \gamma^{\text{vap}}. \end{cases} \quad \begin{matrix} (5.8a) \\ (5.8b) \end{matrix}$$

5.3. Loi d'état de changement de phase

Pour $\alpha = 1, 2$ supposons que $c_{v\alpha} > 0$, $\gamma_\alpha > 1$ et que $c_{v1} \neq c_{v2}$, $c_{v1}\Gamma_1 \neq c_{v2}\Gamma_2$ et $c_{v1}\gamma_1 \neq c_{v2}\gamma_2$. On se place dans le cadre des hypothèses CC (5.6) et CA (5.7).

Considérons maintenant un état à saturation $\mathbf{w} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, \varepsilon) \in \mathcal{C}$. En écrivant l'égalité des pressions, des températures et des potentiels de Gibbs, qui sont des fonctions de l'énergie interne et du volume molaires, on détermine ε_1^* , ε_2^* , τ_1^* et τ_2^* (extrémités du segment τ_{12} du théorème 3.1 à la page 79) en fonction de la température :

✱ l'équilibre isotherme $T_1 = T_2 \stackrel{\text{def}}{=} T$ implique

$$\varepsilon_\alpha^* = c_{v\alpha} T;$$

✱ si on ajoute l'équilibre isobare $P_1 = P_2$ on obtient

$$\tau_2^* = \frac{\Gamma_2 c_{v2}}{\Gamma_1 c_{v1}} \tau_1^*;$$

✱ si enfin on ajoute l'équilibre équipotentiel $g_1 = g_2$ on a

$$\begin{aligned} c_{v1} (\gamma_1 - \ln c_{v1} - \ln T - \Gamma_1 \ln \tau_1^*) - \widehat{s}_1 = \\ = c_{v2} (\gamma_2 - \ln c_{v2} - \ln T - \Gamma_2 \ln \tau_2^* - \Gamma_2 \ln(\Gamma_1 c_{v1}) + \Gamma_2 \ln(\Gamma_2 c_{v2})) - \widehat{s}_2 \end{aligned}$$

d'où

$$\tau_1^* = \left(\frac{(c_{v2})^{c_{v2}}}{(c_{v1})^{c_{v1}}} \frac{(\Gamma_2 c_{v2})^{(\Gamma_2 c_{v2})}}{(\Gamma_1 c_{v1})^{(\Gamma_1 c_{v1})}} \exp(c_{v1}\gamma_1 - c_{v2}\gamma_2 - \widehat{s}_1 + \widehat{s}_2) T^{c_{v2} - c_{v1}} \right)^{\frac{1}{\Gamma_1 c_{v1} - \Gamma_2 c_{v2}}}.$$

On obtient donc

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^* &= c_{v1} T, & \tau_1^* &= D \cdot W^{\Gamma_2 c_{v2}} \cdot T^B, \\ \varepsilon_2^* &= c_{v2} T, & \tau_2^* &= D \cdot W^{\Gamma_1 c_{v1}} \cdot T^B, \end{aligned}$$

où on a défini

$$D \stackrel{\text{def}}{=} \left(\frac{(c_{v2})^{c_{v2}}}{(c_{v1})^{c_{v1}}} \exp(c_{v1}\gamma_1 - c_{v2}\gamma_2 - \widehat{s}_1 + \widehat{s}_2) \right)^{\frac{1}{\Gamma_1 c_{v1} - \Gamma_2 c_{v2}}} > 0,$$

$$W \stackrel{\text{def}}{=} \left(\frac{\Gamma_2 c_{v2}}{\Gamma_1 c_{v1}} \right)^{\frac{1}{\Gamma_1 c_{v1} - \Gamma_2 c_{v2}}} > 0,$$

$$B \stackrel{\text{def}}{=} \frac{c_{v2} - c_{v1}}{\Gamma_1 c_{v1} - \Gamma_2 c_{v2}} \neq 0.$$

Sachant que $\frac{\tau - \tau_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*} = y^* = \frac{\varepsilon - \varepsilon_2^*}{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}$ on obtient l'équation

$$\frac{\varepsilon - c_{v_2} T}{(c_{v_1} - c_{v_2}) T} = \frac{\tau - D \cdot W^{\Gamma_1 c_{v_1}} T^B}{D (W^{\Gamma_2 c_{v_2}} - W^{\Gamma_1 c_{v_1}}) T^B} .$$

Le problème est alors équivalent à résoudre l'équation de changement de phase (voir la définition 2.10 à la page 55) qui, dans le cas de deux gaz parfaits, consiste à chercher les zéros de la fonction (5.9) ci-dessous définie :

Équation de changement de phase

$$f: (0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R} \\ T \mapsto f \stackrel{\text{def}}{=} a_3 T^B + a_2 T^{B-1} + a_1 \quad (5.9)$$

où

$$\begin{aligned} a_1 &\stackrel{\text{def}}{=} \tau(c_{v_2} - c_{v_1}) \neq 0, \\ a_2 &\stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon D W^{\Gamma_1 c_{v_1}} \left[\frac{\Gamma_1 c_{v_1}}{\Gamma_2 c_{v_2}} - 1 \right] \neq 0, \\ a_3 &\stackrel{\text{def}}{=} D c_{v_1} W^{\Gamma_1 c_{v_1}} \left[1 - \frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} \right]. \end{aligned}$$

Pour cela on étudie la fonction (5.9) paramétrée par les quatre coefficients a_i et B . On observe d'abord que

$$\begin{aligned} \text{sgn}(a_1) &= \text{sgn}(c_{v_2} - c_{v_1}), \\ \text{sgn}(a_2) &= \text{sgn}(\Gamma_1 c_{v_1} - \Gamma_2 c_{v_2}), \\ \text{sgn}(a_3) &= \text{sgn}(\Gamma_2 - \Gamma_1). \end{aligned}$$

On a la propriété suivante :

► PROPOSITION 5.3:

Pour un changement de phase liquide-vapeur

- ☞ sous les conditions CC (5.6) on a $B < 0$;
- ☞ sous, de plus, la condition CA (5.7) on a $a_1 \cdot a_3 < 0$

◇

PREUVE.

Observons d'abord que $\text{sgn}(B) = \text{sgn}(a_1 \cdot a_2)$ et considérons le cas $a_2 < 0$ (le cas $a_2 > 0$ est symétrique).

- ☞ Alors $\Gamma_1 c_{v_1} < \Gamma_2 c_{v_2}$: la contraintes (5.6a) établit que l'indice 1 correspond à la phase liquide et l'indice 2 à la phase vapeur. La contrainte (5.6b) impose alors que $c_{v_2} > c_{v_1}$, ce qui donne $a_1 > 0$ et donc $B < 0$.
- ☞ Si on considère de plus la contrainte (5.7), on obtient l'inégalité $\gamma_2 < \gamma_1$ qui donne $a_3 < 0$ et donc $a_1 \cdot a_3 < 0$.

◆

★ **REMARQUE 5.3.** Chercher les zéros de la fonction (5.9) est équivalent à chercher les zéros de la fonction $T \mapsto \tilde{f}$ définie comme

$$\begin{aligned} \tilde{f}: [0, +\infty) &\rightarrow \mathbb{R} \\ T &\mapsto \tilde{f} \stackrel{\text{def}}{=} a_1 T^{1-B} + a_3 T + a_2. \end{aligned} \quad \clubsuit$$

Étude des fonction $T \mapsto f$ et $T \mapsto \tilde{f}$ On cherche maintenant un intervalle qui contient la(les) solution(s) des équations $f(T) = 0 = \tilde{f}(T)$. Pour cela on étudie brièvement le comportement de ces deux fonctions.

Considérons le cas $a_2 < 0, a_1 > 0, a_3 < 0$.

<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; display: inline-block; margin-bottom: 10px;"> $T \mapsto f = a_3 T^B + a_2 T^{B-1} + a_1$ </div> $\lim_{T \rightarrow 0^+} f = \text{sgn}(a_2)\infty = -\infty,$ $\lim_{T \rightarrow +\infty} f = a_1 > 0,$ $f' = T^{B-2}(a_3 B T + a_2(B-1)).$	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; display: inline-block; margin-bottom: 10px;"> $T \mapsto \tilde{f} = a_1 T^{1-B} + a_3 T + a_2$ </div> $\tilde{f}(0) = a_2 < 0,$ $\lim_{T \rightarrow +\infty} \tilde{f} = \text{sgn}(a_1)\infty = +\infty,$ $\tilde{f}' = a_1(1-B)T^{-B} + a_3.$
--	---

Donc

- ☞ la fonction $T \mapsto f$ est strictement croissante sur $]0, +\infty[$,
- ☞ la fonction $T \mapsto \tilde{f}$ est strictement croissante sur $[(-a_1(1-B)/a_3)^{1/B}, +\infty[$.

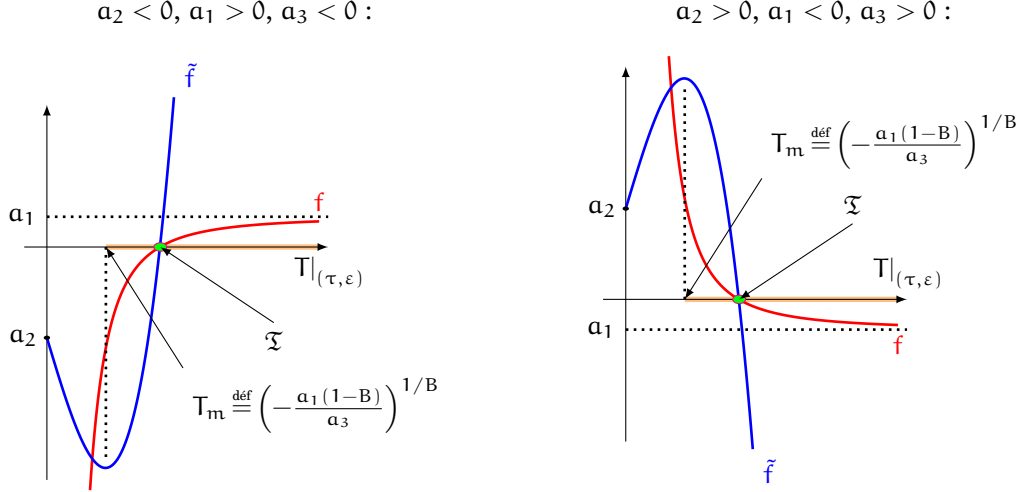
Symétriquement si $a_2 > 0, a_1 < 0, a_3 > 0$ on a

$\lim_{T \rightarrow 0^+} f = \text{sgn}(a_2)\infty = +\infty,$ $\lim_{T \rightarrow +\infty} f = a_1 < 0,$ $f' = T^{B-2}(a_3 B T + a_2(B-1)).$	$\tilde{f}(0) = a_2 > 0,$ $\lim_{T \rightarrow +\infty} \tilde{f} = \text{sgn}(a_1)\infty = -\infty,$ $\tilde{f}' = a_1(1-B)T^{-B} + a_3.$
---	--

Donc

- ☞ la fonction $T \mapsto f$ est strictement décroissante sur $]0, +\infty[$,
- ☞ la fonction $T \mapsto \tilde{f}$ est strictement décroissante sur $[(-a_1(1-B)/a_3)^{1/B}, +\infty[$.

Graphiquement on a les deux cas de la figure 5.1 à la page suivante.


 FIG. 5.1.: Étude des fonctions $T \mapsto f$ et $T \mapsto \tilde{f}$ sous conditions CC (5.6) et CA (5.7)

En conclusion, pour $a_i \neq 0$ et sous les conditions CC (5.6) et CA (5.7), il existe une unique solution \mathfrak{T} de l'équation $f(T) = 0$ (ou bien de l'équation $\tilde{f}(T) = 0$). Cette solution appartient à l'intervalle ouvert

$$\left] \left(-\frac{a_1(1-B)}{a_3} \right)^{1/B}, +\infty \right[.$$

Même si la solution de l'équation $f(T) = 0$ n'est pas explicite, grâce à cette étude on a trouvé un intervalle qui contient la solution et dans lequel la fonction $T \mapsto f$ est monotone. Ceci permet d'écrire un schéma numérique, par exemple un schéma de point fixe, qui en donne une estimation. On peut donc conclure que :

Pour tout état de mélange à l'équilibre (τ, ε) fixé, il existe une unique température de saturation \mathfrak{T} et le segment τ_{12} , défini au théorème 3.1 à la page 79, est donné par

$$\begin{aligned} \tau_1^* &= D \cdot W^{\Gamma_2 c_{v_2}} \cdot \mathfrak{T}^B, & \varepsilon_1^* &= c_{v_1} \mathfrak{T}, & s_1^* &= s_1(\tau_1^*, \varepsilon_1^*), \\ \tau_2^* &= D \cdot W^{\Gamma_1 c_{v_1}} \cdot \mathfrak{T}^B, & \varepsilon_2^* &= c_{v_2} \mathfrak{T}, & s_2^* &= s_2(\tau_2^*, \varepsilon_2^*). \end{aligned}$$

La fraction volumique correspondante est donc

$$y^* = \frac{\varepsilon - c_{v_2} \mathfrak{T}}{(c_{v_1} - c_{v_2}) \mathfrak{T}}.$$

★ **REMARQUE 5.4.** Dans le cadre de la théorie développée au chapitre 2, la condition CA (5.7) n'était pas nécessaire. Voyons donc ce qui se passe lorsque on renonce à cette hypothèse. Trois cas se présentent :

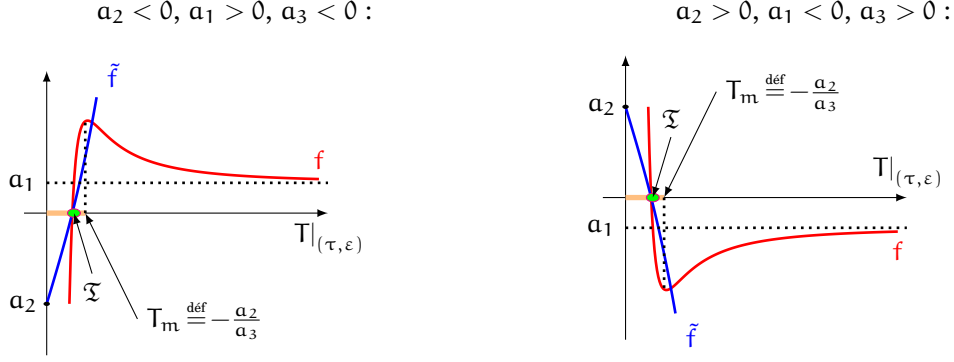


FIG. 5.2.: Étude des fonctions $T \mapsto f$ et $T \mapsto \tilde{f}$ sous condition CC (5.6) lorsque $a_1 \cdot a_3 > 0$ (exemple de violation de la condition CA (5.7))

- ☛ si $c^{\text{liq}} < c^{\text{vap}}$ mais on continue à avoir $\gamma^{\text{liq}} > \gamma^{\text{vap}}$ alors tous ce qu'on a dit reste valable ;
- ☛ si $\gamma^{\text{liq}} = \gamma^{\text{vap}}$ alors $a_3 = 0$ et il y a une unique solution de l'équation $f(T) = 0$ donnée par $T = \left(-\frac{a_2}{a_1}\right)^{\Gamma/(\Gamma+1)}$.
- ☛ si enfin $\gamma^{\text{liq}} < \gamma^{\text{vap}}$ on a toujours $B < 0$ mais $a_1 \cdot a_3 > 0$. L'étude des fonction $T \mapsto f$ et $T \mapsto \tilde{f}$, pour le cas $a_2 < 0, a_1 > 0, a_3 < 0$ (l'autre cas est symétrique), montre que
 - ♣ la fonction $T \mapsto f$ est strictement croissante sur $]0, -\frac{a_2}{a_3}[$,
 - ♣ la fonction $T \mapsto \tilde{f}$ est strictement croissante sur $[0, +\infty[$.

Graphiquement on peut avoir un des deux cas (symétrique) de la figure 5.2.

Donc il existe une unique température \mathfrak{T} solution de l'équation $f(T) = 0$ (ou bien de l'équation $\tilde{f}(T) = 0$) et cette solution appartient à l'intervalle ouvert

$$\left] 0, -\frac{a_2}{a_3} \right[.$$

5.3.1. Courbe de coexistence

En imposant l'égalité des potentiels de Gibbs, écrits en fonction de la pression et de la température

$$\left[\begin{array}{l} \varepsilon_\alpha = c_{v_\alpha} T \\ \tau_\alpha = c_{v_\alpha} \Gamma_\alpha \frac{T}{P} \end{array} \right] \Rightarrow g_\alpha(P, T) = c_{v_\alpha} T \left(\gamma_\alpha - \ln \left(c_{v_\alpha}^\gamma \Gamma_\alpha^{\Gamma_\alpha} T^{\gamma_\alpha} P^{-\Gamma_\alpha} \right) \right) - T \hat{s}_\alpha,$$

on détermine la courbe de coexistence des deux phases dans le plan (T, P) . Ainsi, lors de la transition de phase, P et T sont reliées par la relation

$$P = \mathfrak{A}^* T^{(1-B)} \quad (5.10)$$

TAB. 5.1.: Paramètres des lois d'état des figures 5.3 5.4 à la page 135 et 5.5 à la page 136. Ils respectent les conditions CC (5.6) et CA (5.7)

		Liquide	Vapeur
γ		1.9	1.6
c_v	[J/(kg · K)]	1040	1816.2
\hat{s}	[J/(kg · K)]	0	0

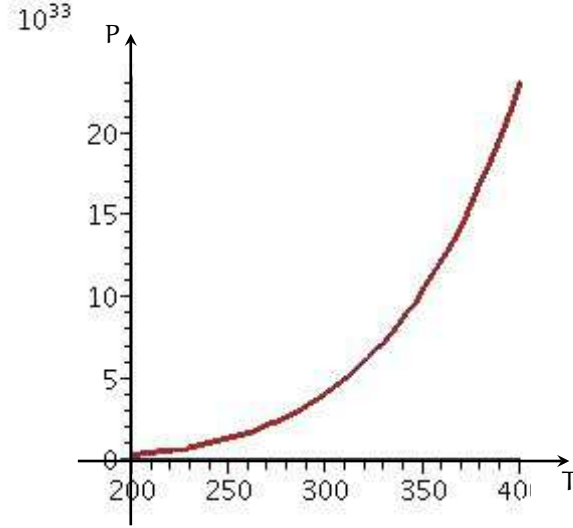


FIG. 5.3.: Courbe de coexistence $T \mapsto P^{\text{sat}}$ où la température est mesurée en kelvin et la pression en pascal

avec \mathfrak{A}^* constante définie par

$$\mathfrak{A}^* \stackrel{\text{def}}{=} \left[\frac{\left(\Gamma_2^{\Gamma_2} c_{v_2}^{\gamma_2} \right)^{c_{v_2}}}{\left(\Gamma_1^{\Gamma_1} c_{v_1}^{\gamma_1} \right)^{c_{v_1}}} \cdot \exp(c_{v_1} \gamma_1 - c_{v_2} \gamma_2 - \hat{s}_1 + \hat{s}_2) \right]^{\frac{1}{(c_{v_2} \Gamma_2 - c_{v_1} \Gamma_1)}} = \frac{a_1 \varepsilon}{a_2 B \tau} > 0.$$

À la figure 5.3 on a dessiné dans le plan (T, P) la courbe de coexistence pour le cas de deux gaz parfaits dont les paramètres sont donnés au tableaux 5.1.

Pour fixer les idées, on suppose désormais que la phase $\alpha = 1$ est la moins dense ($\tau_1^* > \tau_2^*$), autrement dit l'indice $\alpha = 1$ correspond à la phase gazeuse tandis que l'indice $\alpha = 2$ correspond à la phase liquide. On a

$$(\tau, T) \mapsto P^{\text{eq}} = \begin{cases} P_2 = \Gamma_2 c_{v_2} \frac{T}{\tau} & \text{si } \tau < DW^{\Gamma_1 c_{v_1}} T^B, \\ P_m = \mathfrak{A}^* T^{(1-B)} & \text{si } DW^{\Gamma_1 c_{v_1}} T^B < \tau < DW^{\Gamma_2 c_{v_2}} T^B, \\ P_1 = \Gamma_1 c_{v_1} \frac{T}{\tau} & \text{si } \tau > DW^{\Gamma_2 c_{v_2}} T^B. \end{cases}$$

Alors, puisque la relation qui lie la température T à l'énergie interne ε est une bijection, on est maintenant en mesure de donner l'équation d'état d'un fluide pouvant exister sous deux phases dans l'espace (τ, ε, P) :

$$(\tau, \varepsilon) \mapsto P^{\text{eq}} = \begin{cases} P_2 = \frac{\Gamma_2 \varepsilon}{\tau} & \text{si } \tau < DW^{\Gamma_1 c_{v1}} \mathfrak{T}^B, \\ P_m = \mathfrak{A}^* \mathfrak{T}^{(1-B)} & \text{si } DW^{\Gamma_1 c_{v1}} \mathfrak{T}^B < \tau < DW^{\Gamma_2 c_{v2}} \mathfrak{T}^B, \\ P_1 = \frac{\Gamma_1 \varepsilon}{\tau} & \text{si } \tau > DW^{\Gamma_2 c_{v2}} \mathfrak{T}^B, \end{cases}$$

avec \mathfrak{T} racine de la fonction (5.9).

La pression ainsi définie est continue et de classe \mathcal{C}^1 par morceaux (c'est-à-dire pour tout $\mathbf{w} \in \mathcal{C} \setminus \{\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*\}$) par construction.

Cette équation d'état incomplète dérive en effet de l'équation d'état complète

$$(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}} = \begin{cases} s_1 = c_{v1} \ln(\varepsilon \tau^{\Gamma_1}) & \text{si } y^* = 1, \\ s_{12} = y^* s_1^* + (1 - y^*) s_2^* & \text{si } 0 < y^* < 1, \\ s_2 = c_{v2} \ln(\varepsilon \tau^{\Gamma_2}) & \text{si } y^* = 0, \end{cases}$$

où $s_\alpha^* \stackrel{\text{def}}{=} s_\alpha(\mathbf{w}_\alpha^*)$ et y^* sont fonctions de τ et de ε .

5.3.2. Propriété de la loi de changement de phase

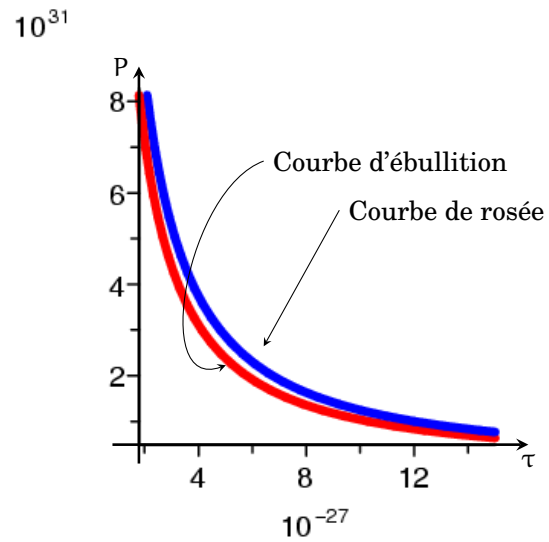
Le modèle présenté dans cette section suggère plusieurs remarques.

5.3.2.a. Point critique et point triple

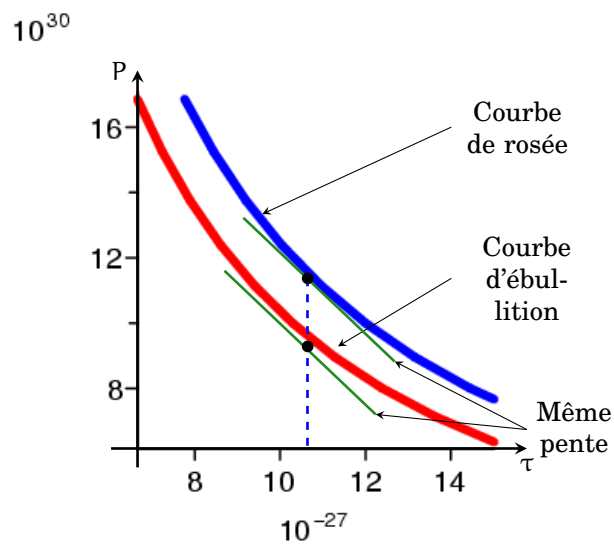
Contrairement au changement de phase réel liquide \leftrightarrow vapeur, ce modèle ne présente ni de point critique ni de point triple. Il n'existe pas de zone où ces deux phases sont indifférenciées. Le modèle est donc un modèle très simple dont l'étude ne constitue qu'une première étape vers l'étude des cas réels.

5.3.2.b. Dôme de saturation

On vérifie numériquement que les pentes de la courbe d'ébullition et de la courbe de rosée sont toutes les deux négatives (alors qu'expérimentalement la pente de la courbe d'ébullition des fluides non rétrogrades telle l'eau est positive). À la figure 5.4 à la page ci-contre on a dessiné dans le plan (τ, P) le dôme de saturation pour le cas de deux gaz parfaits dont les paramètres sont donnés au tableau 5.1 à la page précédente. On voit bien l'allure non physique du dôme de saturation et l'absence de point critique. En effet, numériquement on vérifie que, à la même température, les deux courbes ont toujours la même pente ξ .

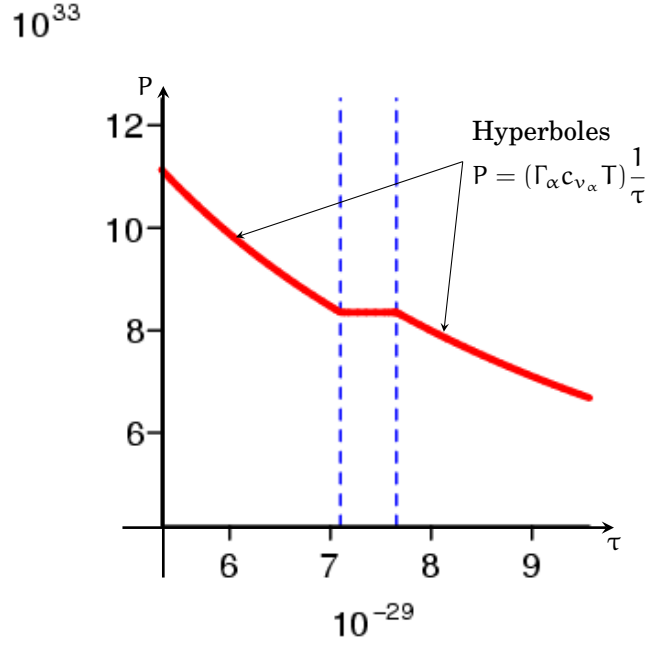


(a) Dôme de saturation



(b) Zoom de la figure 5.4a

FIG. 5.4.: Dôme de saturation : courbe d'ébullition et courbe de rosée

FIG. 5.5.: Représentation de l'isotherme $T = 300\text{ K}$ dans le plan (τ, P)

5.3.2.c. Isothermes

Le comportement des isothermes est classique (voir figure 5.5) : puisque le changement de phase se fait à pression et température constantes, les isothermes et les isobares coïncident dans la zone de transition. Les isothermes sont donc des horizontales dans le plan (τ, P) dans cette zone, ce qui entraîne une discontinuité de la pente de l'isotherme le long de la courbe de saturation ($\tau = \tau_\alpha^*$) : lorsque l'isotherme traverse la courbe de saturation, sa pente est discontinue et elle perd localement sa convexité lorsque la phase pure est la phase la moins dense (vapeur), c'est-à-dire pour les points sur la courbe de rosée.

5.3.2.d. Dérivée fondamentale

Pour étudier la convexité des courbes isentropes on étudie le signe de $\left. \frac{\partial^2 P^{\text{eq}}}{\partial \tau^2} \right|_s$ séparément dans les trois zones (phase liquide, «phase mélange», phase vapeur).

Si on est dans un état monophasique, des calculs élémentaires montrent que

$$\left. \frac{\partial^2 P^{\text{eq}}}{\partial \tau^2} \right|_s = \left. \frac{\partial^2 P_\alpha}{\partial \tau_\alpha^2} \right|_{s_\alpha} = \gamma_\alpha (\gamma_\alpha + 1) \frac{P_\alpha}{\tau_\alpha^2} > 0.$$

Si on est dans un état de mélange à l'équilibre, alors la pression ne dépend que de la température selon la relation

$$P_m = \mathfrak{A} T^{(1-B)}$$

et la dérivée seconde adiabatique se réécrit en fonction des dérivées isothermes comme

$$\left. \frac{\partial^2 P_m}{\partial \tau^2} \right|_s = \frac{T}{((c_v)_m)^2} \left(\frac{dP_m}{dT} \right)^2 \left\{ 3T \frac{d^2 P_m}{dT^2} + \frac{dP_m}{dT} \left[1 - \frac{T}{(c_v)_m} \left. \frac{\partial (c_v)_m}{\partial T} \right|_\tau \right] \right\}.$$

Puisque

$$\frac{dP_m}{dT} = \mathfrak{A}(1-B)T^{-B} \quad \text{et} \quad \frac{d^2 P_m}{dT^2} = \mathfrak{A}(1-B)(-B)T^{-B-1},$$

on obtient

$$\left. \frac{\partial^2 P_m}{\partial \tau^2} \right|_s = \frac{T}{((c_v)_m)^2} (\mathfrak{A}(1-B)T^{-B})^3 \left\{ 1 - 3B - \frac{T}{(c_v)_m} \left. \frac{\partial (c_v)_m}{\partial T} \right|_\tau \right\}.$$

Donc

$$\text{sgn} \left(\left. \frac{\partial^2 P_m}{\partial \tau^2} \right|_s \right) = \text{sgn} \left(1 - 3B - \frac{T}{(c_v)_m} \left. \frac{\partial (c_v)_m}{\partial T} \right|_\tau \right).$$

Il reste à calculer $(c_v)_m$ et sa dérivée. Par définition

$$(c_v)_m \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial \varepsilon^{\text{eq}}}{\partial T} \right|_\tau$$

avec

$$\varepsilon^{\text{eq}} = y c_{v_1} T + (1-y) c_{v_2} T$$

et

$$(T, \tau) \mapsto y = \frac{\tau - D \cdot W^{\Gamma_1 c_{v_1}} \cdot T^B}{D \cdot (W^{\Gamma_2 c_{v_2}} - W^{\Gamma_1 c_{v_1}}) \cdot T^B}.$$

Puisque

$$\left. \frac{\partial y}{\partial T} \right|_\tau = -B T^{-B-1} \frac{\tau}{D \cdot (W^{\Gamma_2 c_{v_2}} - W^{\Gamma_1 c_{v_1}})},$$

alors

$$\begin{aligned} (c_v)_m &\stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial \varepsilon^{\text{eq}}}{\partial T} \right|_\tau = \\ &= (c_{v_1} - c_{v_2}) T \left. \frac{\partial y}{\partial T} \right|_\tau + y c_{v_1} + (1-y) c_{v_2} = \\ &= \frac{(1-B)(c_{v_1} - c_{v_2})\tau + D \cdot (c_{v_2} W^{\Gamma_2 c_{v_2}} - c_{v_1} W^{\Gamma_1 c_{v_1}}) T^B}{D \cdot (W^{\Gamma_2 c_{v_2}} - W^{\Gamma_1 c_{v_1}}) T^B} = \\ &= \frac{(1-B)(c_{v_1} - c_{v_2})\tau}{D \cdot (W^{\Gamma_2 c_{v_2}} - W^{\Gamma_1 c_{v_1}})} T^{-B} + \frac{c_{v_2} W^{\Gamma_2 c_{v_2}} - c_{v_1} W^{\Gamma_1 c_{v_1}}}{W^{\Gamma_2 c_{v_2}} - W^{\Gamma_1 c_{v_1}}}. \end{aligned}$$

En dérivant cette quantité on obtient

$$\left. \frac{\partial (c_v)_m}{\partial T} \right|_\tau = \frac{-B(1-B)(c_{v_1} - c_{v_2})\tau}{D \cdot (W^{\Gamma_2 c_{v_2}} - W^{\Gamma_1 c_{v_1}}) T^{B+1}}.$$

On calcule le produit

$$\begin{aligned} \frac{T}{(c_v)_m} \left. \frac{\partial (c_v)_m}{\partial T} \right|_\tau &= \frac{-B(1-B)(c_{v_1} - c_{v_2})\tau}{(1-B)(c_{v_1} - c_{v_2})\tau + D \cdot (c_{v_2} W^{\Gamma_2 c_{v_2}} - c_{v_1} W^{\Gamma_1 c_{v_1}}) T^B} = \\ &= -\frac{B(1-B)}{(1-B) + \frac{a_3}{a_1} T^B}. \end{aligned}$$

En conclusion sous les conditions CC (5.6) on a

$$\begin{aligned} \operatorname{sgn} \left(\left. \frac{\partial^2 p_m}{\partial \tau^2} \right|_s \right) &= \operatorname{sgn} \left\{ 1 - 3B - \frac{T}{(c_v)_m} \left. \frac{\partial (c_v)_m}{\partial T} \right|_\tau \right\} = \\ &= \operatorname{sgn} \left\{ 1 - 3B + \frac{B(1-B)}{(1-B) + \frac{a_3}{a_1} T^B} \right\} = \\ &= \operatorname{sgn} \left\{ \frac{(1-2B)(1-B) + (1-3B) \frac{a_3}{a_1} T^B}{(1-B) + \frac{a_3}{a_1} T^B} \right\}. \end{aligned}$$

Puisque

$$0 = a_3 T^B + a_2 T^{B-1} + a_1,$$

alors

$$\begin{aligned} \operatorname{sgn} \left(\left. \frac{\partial^2 p_m}{\partial \tau^2} \right|_s \right) &= \operatorname{sgn} \left\{ \frac{(1-2B)(1-B) + (1-3B) \frac{a_3}{a_1} T^B}{1-B - \frac{a_2 T^{B-1} + a_1}{a_1}} \right\} = \\ &= -\operatorname{sgn} \left\{ \frac{(1-2B)(1-B) + (1-3B) \frac{a_3}{a_1} T^B}{B + \frac{a_2 T^{B-1}}{a_1}} \right\}. \end{aligned}$$

Sous les conditions CC (5.6) on a $a_1 \cdot a_2 < 0$ donc $B + \frac{a_2 T^{B-1}}{a_1} < 0$ et alors

$$\operatorname{sgn} \left(\left. \frac{\partial^2 p_m}{\partial \tau^2} \right|_s \right) = \operatorname{sgn} \left\{ (1-2B)(1-B) + (1-3B) \frac{a_3}{a_1} T^B \right\}.$$

Or

$$\begin{aligned} \operatorname{sgn} \left\{ (1-2B)(1-B) + (1-3B) \frac{a_3}{a_1} T^B \right\} &= \operatorname{sgn} \left\{ (1-2B)(1-B) + (1-3B) \frac{-a_2 T^{B-1} - a_1}{a_1} \right\} = \\ &= \operatorname{sgn} \left\{ 2B^2 - (1-3B) \frac{a_2 T^{B-1}}{a_1} \right\} > 0. \end{aligned}$$

Donc, sous l'unique condition CC (5.6),

$$\left. \frac{\partial^2 p_m}{\partial \tau^2} \right|_s > 0.$$

En résumé $\left. \frac{\partial^2 p^{\text{eq}}}{\partial \tau^2} \right|_s > 0$ dans $]0, \tau_{\text{liq}}^*[$, dans $]\tau_{\text{liq}}^*, \tau_{\text{vap}}^*[$ et dans $]\tau_{\text{vap}}^*, +\infty[$. Pour étudier comment elle varie en passant d'un intervalle à l'autre on va maintenant étudier comment varie la vitesse du son.

5.3.2.e. Vitesse du son

Le carré de la vitesse du son est défini comme

$$(c^*)^2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{P}{\rho^2} \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} \Big|_{\rho} + \frac{\partial P}{\partial \rho} \Big|_{\varepsilon} = \tau^2 \left(P \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} \Big|_{\tau} - \frac{\partial P}{\partial \tau} \Big|_{\varepsilon} \right). \quad (5.11)$$

Rappelons que dans la zone de transition $P = \mathfrak{A}^* T^{(1-B)}$ avec \mathfrak{A}^* une constante positive. Si on définit les quantités

$$\tilde{a}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{a_1}{\tau} \quad \text{et} \quad \tilde{a}_2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{a_2}{\varepsilon},$$

puisque T est définie implicitement par $f(T) = 0$ avec

$$f(T) = a_3 T^B + \varepsilon \tilde{a}_2 T^{B-1} + \tau \tilde{a}_1,$$

on a

$$\frac{\partial T}{\partial \varepsilon} \Big|_{\tau} = - \frac{\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \Big|_{\tau}}{\frac{\partial f}{\partial T} \Big|_{\tau}} = \frac{-\tilde{a}_2 T}{B a_3 T + (B-1) \tilde{a}_2 \varepsilon} \quad \text{et} \quad \frac{\partial T}{\partial \tau} \Big|_{\varepsilon} = - \frac{\frac{\partial f}{\partial \tau} \Big|_{\varepsilon}}{\frac{\partial f}{\partial T} \Big|_{\varepsilon}} = \frac{-\tilde{a}_1 T^{(2-B)}}{B a_3 T + (B-1) \tilde{a}_2 \varepsilon}.$$

Donc

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} \Big|_{\tau} &= \frac{dP^{\text{sat}}}{dT} \frac{\partial T}{\partial \varepsilon} \Big|_{\tau} = \mathfrak{A}^* (1-B) T^{-B} \frac{\partial T}{\partial \varepsilon} \Big|_{\tau} = -\mathfrak{A}^* (1-B) T^{1-B} \frac{\tilde{a}_2}{B a_3 T + (B-1) a_2}, \\ \frac{\partial P}{\partial \tau} \Big|_{\varepsilon} &= \frac{dP^{\text{sat}}}{dT} \frac{\partial T}{\partial \tau} \Big|_{\varepsilon} = \mathfrak{A}^* (1-B) T^{-B} \frac{\partial T}{\partial \tau} \Big|_{\varepsilon} = -\mathfrak{A}^* (1-B) T^{2(1-B)} \frac{\tilde{a}_1}{B a_3 T + (B-1) a_2}, \end{aligned}$$

d'où

$$(c^*)^2 = -\tau^2 \mathfrak{A}^* (1-B) T^{2(1-B)} \left(\frac{\mathfrak{A}^* \tilde{a}_2 - \tilde{a}_1}{B a_3 T + (B-1) a_2} \right).$$

On a alors

$$(\tau, \varepsilon) \mapsto (c^*)^2 = \begin{cases} \gamma_1 \Gamma_1 \varepsilon & \text{si } y^* = 1, \\ \tau^2 \mathfrak{A}^* (B-1) \left(\frac{\mathfrak{A}^* \tilde{a}_2 - \tilde{a}_1}{B a_3 T + (B-1) \tilde{a}_2 \varepsilon} \right) T^{2(1-B)} & \text{si } 0 < y^* < 1, \\ \gamma_2 \Gamma_2 \varepsilon & \text{si } y^* = 0, \end{cases}$$

avec T et y^* fonction de τ et de ε .

En ce qui concerne le signe de $(c^*)^2$ dans la zone de mélange on a

$$\text{sgn}((c^*)^2) = -\text{sgn} \left((1-B) \frac{\mathfrak{A}^* \tilde{a}_2 - \tilde{a}_1}{B a_3 T + (B-1) a_2} \right).$$

Sous conditions CC (5.6) on a $B < 0$ et $a_1 \cdot a_2 < 0$ donc

$$(1-B) \frac{\mathfrak{A}^* \tilde{a}_2 - \tilde{a}_1}{B a_3 T + (B-1) a_2} T^{(1-B)} = \frac{(B-1) \left(\frac{1-B}{B} \right) \frac{\tilde{a}_1}{a_2}}{T^{(B-1)} + B \frac{a_1}{a_2}} < 0.$$

On obtient alors

$$\text{sgn}((c^*)^2) = -\text{sgn}\left(\frac{(B-1)\left(\frac{1-B}{B}\right)\frac{\bar{a}_1}{a_2}}{T^{(B-1)} + B\frac{a_1}{a_2}}\right) > 0,$$

comme prévu par le théorème 3.2 à la page 84. À titre d'exemple on a représenté sur les figures 5.6 à la page ci-contre et 5.7 à la page 142 la vitesse du son le long d'une isotherme.

5.3.2.f. Isentropes

L'étude du signe de la dérivée fondamentale et l'évaluation du saut de la vitesse du son permettent d'observer directement que les isentropes présentent le même symptôme que les isothermes : elles sont convexes séparément dans les trois zones (phase liquide, mélange, phase vapeur) mais lorsque une isentrope traverse la courbe de saturation, sa pente est discontinue ; de plus, elle perd localement sa convexité lorsque la phase pure est la phase la moins dense (vapeur).

5.3.2.g. Hessienne de l'entropie

Vérifions maintenant les propriétés énoncées au théorème 3.1 à la page 79 concernant la matrice hessienne d^2s^{eq} pour les états \mathbf{w} de mélange à l'équilibre :

$$s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}}(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) + s_{\tau\tau}^{\text{eq}}(\tau_1^* - \tau_2^*) = 0, \quad (5.12a)$$

$$s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}}(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) + s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}}(\tau_1^* - \tau_2^*) = 0, \quad (5.12b)$$

$$s_{\tau\tau}^{\text{eq}} s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} = (s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}})^2, \quad (5.12c)$$

$$s_{\tau\tau}^{\text{eq}} = \left(\frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*}\right)^2 s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}}; \quad (5.12d)$$

$$s_{\tau\tau}^{\text{eq}} < 0, \quad (5.13a)$$

$$s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} < 0, \quad (5.13b)$$

$$s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}} > 0; \quad (5.13c)$$

$$p^{\text{eq}} \neq -\frac{(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*)}{(\tau_1^* - \tau_2^*)}, \quad (5.14a)$$

$$T^{\text{eq}} \neq \frac{(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*)}{(s_1^* - s_2^*)}. \quad (5.14b)$$

On se place sous les conditions CC et $a_1 \cdot a_3 < 0$ (si on renonce à la condition $a_1 \cdot a_3 < 0$ il suffit de considérer la fonction $T \mapsto \tilde{f}$ au lieu de la fonction $T \mapsto f$).

TAB. 5.2.: Paramètres des lois d'état des figures 5.6 et 5.7 à la page suivante

		Liquide	Vapeur
γ		2.9	2.17
c_v	[J/(kg · K)]	1040	1816.2
\hat{s}	[J/(kg · K)]	0	0

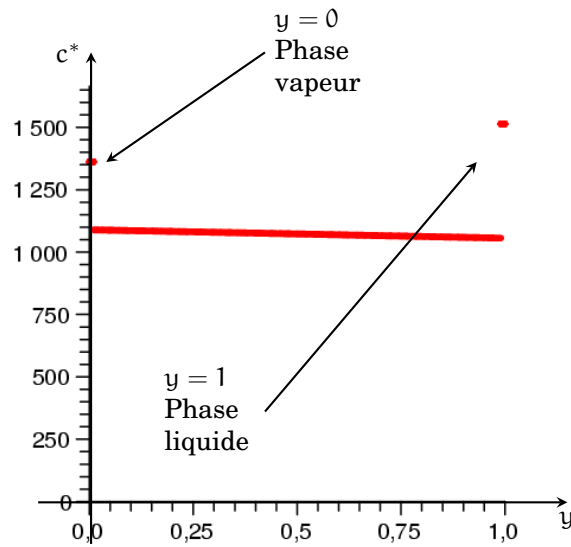
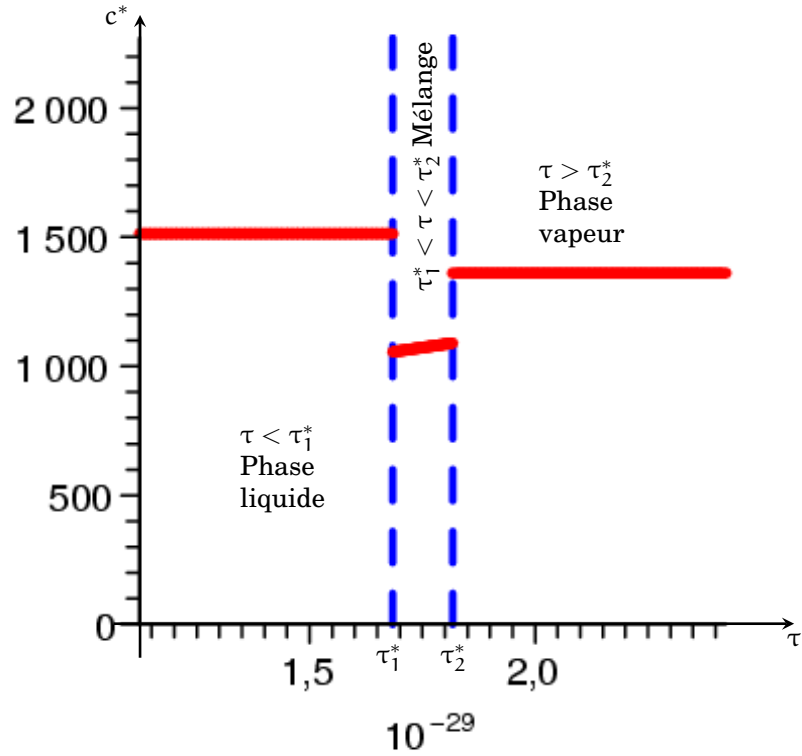
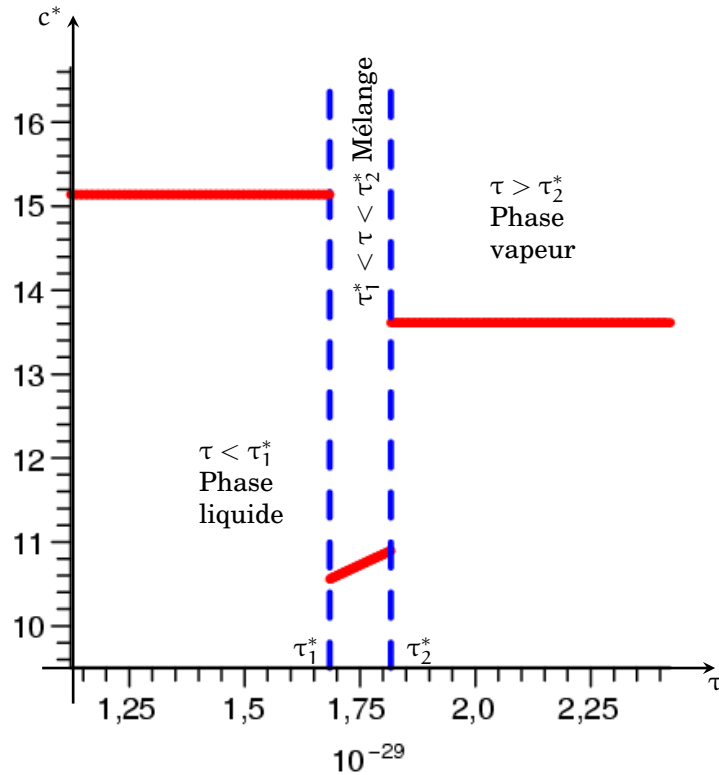


FIG. 5.6.: Vitesse du son $(y, T) \mapsto c^*$ le long de l'isotherme $T = 400$ K : elle est toujours positive mais discontinue à travers les courbes de saturation, dans les phases pures ($y \in \{0, 1\}$) elle est plus grande que dans le mélange



(a) Vitesse du son $(\tau, T) \mapsto c^*$ le long de l'isotherme $T = 400$ K



(b) Zoom de la figure 5.7a

FIG. 5.7.: La vitesse du son est toujours positive mais elle est discontinue à travers les courbes de saturation $\tau = \tau_\alpha^*$: dans les phases pures elle est plus grande que dans le mélange.

Propriété (5.13) : Puisque $s_\varepsilon^{\text{eq}} = 1/T$ et $s_\tau^{\text{eq}} = P/T$, on a

$$\begin{aligned} s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} &= -\frac{\frac{\partial T}{\partial \varepsilon}}{T^2} = \frac{\tilde{a}_2}{a_3 B T^2 + a_2 (B-1) T}, \\ s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}} &= -\frac{\frac{\partial T}{\partial \tau}}{T^2} = \frac{\tilde{a}_1 T^{-B}}{a_3 B T + a_2 (B-1)}, \\ s_{\tau\tau}^{\text{eq}} &= \frac{\frac{\partial P}{\partial \tau}}{T} - \frac{P}{T^2} \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{-\mathfrak{A}^* (1-B) \tilde{a}_1 T^{(1-2B)} + \tilde{a}_1 P T^{-B}}{B a_3 T + (B-1) a_2} = \frac{\mathfrak{A}^* B \tilde{a}_1 T^{(1-2B)}}{B a_3 T + (B-1) a_2}. \end{aligned}$$

Donc si $a_1 > 0$ alors (cf. théorème 5.3 à la page 129) $a_2 < 0$ et $a_3 < 0$ d'où

$$s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} < 0, \quad s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}} < 0, \quad s_{\tau\tau}^{\text{eq}} > 0.$$

(Le cas $a_1 < 0$ est symétrique). On a donc vérifié les (5.13a)-(5.13b)-(5.13c).

Propriété (5.12c) : Observons que

$$(s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}})^2 = \frac{\tilde{a}_1^2 T^{-2B}}{(a_3 B T + a_2 (B-1))^2} \quad \text{et} \quad s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} s_{\tau\tau}^{\text{eq}} = \frac{\tilde{a}_1 \tilde{a}_2 B \mathfrak{A}^* T^{-2B}}{(a_3 B T + a_2 (B-1))^2}.$$

Puisque $\mathfrak{A}^* = \frac{\tilde{a}_1}{\tilde{a}_2 B}$ on a la (5.12c).

Propriétés (5.12a)-(5.12b)-(5.12d) : On a

$$\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^* = (c_{v_1} - c_{v_2}) T = \tilde{a}_1 T$$

et

$$\tau_1^* - \tau_2^* = D W^{\Gamma_1 c_{v_1}} \left(\frac{\Gamma_1 c_{v_1}}{\Gamma_2 c_{v_2}} - 1 \right) T^B = \tilde{a}_2 T^B.$$

Puisque

$$\frac{s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}}}{s_{\tau\tau}^{\text{eq}}} = \frac{\tilde{a}_2}{\tilde{a}_1 T^{1-B}} \quad \text{et} \quad \frac{s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}}}{s_{\tau\tau}^{\text{eq}}} = \frac{1}{\mathfrak{A}^* B T^{1-B}} = \frac{\tilde{a}_2}{\tilde{a}_1 T^{1-B}},$$

on retrouve les (5.12a), (5.12b) et (5.12d).

Propriété (5.14) : On sait que $P = \mathfrak{A}^* T^{1-B} = \frac{\tilde{a}_1}{\tilde{a}_2 B} T^{1-B}$.

Puisque $\frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*} = \frac{\tilde{a}_1}{\tilde{a}_2} T^{1-B}$ et par hypothèse $B < 0$, on a bien $P \neq -\frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*}$.

De même, puisque $\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^* = -\tilde{a}_1 T$ et $s_1^* - s_2^* = \exp(c_{v_1} \gamma_1 - c_{v_2} \gamma_2)$, on a $T \neq \frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{s_1^* - s_2^*}$ (car $f(\frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{s_1^* - s_2^*}) \neq 0$).

On a donc retrouvé explicitement les propriétés du théorème 3.1 à la page 79.

5.4. Hydrodynamique

Considérons les équations d'Euler décrivant l'évolution d'un fluide compressible non visqueux en l'absence d'échanges de chaleur avec l'extérieur et fermons ce système par la loi d'état de changement de phase. On a démontré au théorème 3.2 à la page 84

que le système ainsi fermé est strictement hyperbolique. Dans le cas de deux phases décrites par deux lois de type gaz parfait polytropique on peut le vérifier directement.

Le système des équations d'Euler en une dimension d'espace s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + P^{\text{eq}}) = 0, \\ \partial_t(\rho(\varepsilon + u^2/2)) + \partial_x(\rho(\varepsilon + u^2/2) + P^{\text{eq}})u = 0. \end{cases} \quad \text{avec } \rho = \frac{1}{\tau}.$$

Pour des solutions régulières $\mathbf{W} \stackrel{\text{def}}{=} (\rho, u, \varepsilon)$, le système peut être mit en la forme quasi-linéaire équivalente

$$\partial_t \mathbf{W} + A(\mathbf{W}) \partial_x \mathbf{W} = \mathbf{0}$$

où la matrice jacobienne $A(\mathbf{W})$ du flux du système est

$$A(\mathbf{W}) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} u & \rho & 0 \\ \frac{1}{\rho} \frac{\partial P^{\text{eq}}}{\partial \rho} \Big|_{\varepsilon} & u & \frac{1}{\rho} \frac{\partial P^{\text{eq}}}{\partial \varepsilon} \Big|_{\rho} \\ 0 & \frac{P^{\text{eq}}}{\rho} & u \end{pmatrix}.$$

Puisque $P(T(1/\rho, \varepsilon)) = \mathfrak{A}^* T^{(1-B)}$ on a

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} \Big|_{\rho} &= -\mathfrak{A}^* (1-B) T^{1-B} \frac{\tilde{a}_2}{B a_3 T + (B-1) a_2}, \\ \frac{\partial P}{\partial \rho} \Big|_{\varepsilon} &= \frac{1}{\rho^2} \mathfrak{A}^* (1-B) T^{2(1-B)} \frac{\tilde{a}_1}{B a_3 T + (B-1) a_2}. \end{aligned}$$

Rappelons que $\frac{\partial P}{\partial \varepsilon} \Big|_{\rho}$ et $\frac{\partial P}{\partial \rho} \Big|_{\varepsilon}$ sont discontinue pour les valeurs de ρ et ε correspondantes à la courbe de saturation.

On s'intéresse alors à la diagonalisabilité de cette matrice jacobienne. Elle possède les trois valeurs propres

$$\lambda_1 \stackrel{\text{def}}{=} u - c^*, \quad \lambda_2 \stackrel{\text{def}}{=} u, \quad \lambda_3 \stackrel{\text{def}}{=} u + c^*$$

et les trois vecteurs propres à droite

$$\mathbf{r}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \rho^2 \\ -c^* \rho \\ P^{\text{eq}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_2 \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \partial P^{\text{eq}} / \partial \varepsilon \\ 0 \\ -\partial P^{\text{eq}} / \partial \rho \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_3 \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \rho^2 \\ c^* \rho \\ P^{\text{eq}} \end{pmatrix},$$

où c^* est la vitesse du son définie en (5.11). Il est évident que $c^* > 0$ dans les phases pures et on a vu à la section précédente que $c^* > 0$ aussi dans la zone de mélange donc le système est strictement hyperbolique.

5.5. Conclusion

Dans ce chapitre on a présenté un modèle explicite de loi d'état de changement de phase lorsque les deux phases sont décrites par deux lois de type gaz parfait polytropique. Même si on sait que ce type de loi ne décrit pas de façon satisfaisante les propriétés thermodynamiques des fluides (surtout la phase liquide), le fait de considérer que chaque phase suit une loi de gaz parfait a toutefois un intérêt majeur : la détermination de la loi de changement de phase a été réduite à la recherche de l'unique racine d'une équation polynômial (avec exposant réel) simple. En faisant ainsi on a pu vérifier directement les propriétés illustrées au chapitre 3 de la loi de changement de phase, notamment la stricte hyperbolicité du système des équations d'Euler.

Le modèle présenté est l'exemple de loi de changement de phase la plus simple que l'on puisse considérer et dont l'étude ne constitue qu'une première étape vers l'étude des cas réels. Nous avons vu cependant qu'il possède déjà des caractéristiques intéressantes, notamment :

transition du 1^{er} ordre : pour que ces deux lois d'états puissent représenter les deux phases il a été nécessaire d'éliminer certaines cas, c'est-à-dire les cas où $c_{v_1} = c_{v_2}$ ou $c_{v_1}\Gamma_1 = c_{v_2}\Gamma_2$ ou $c_{v_1}\gamma_1 = c_{v_2}\gamma_2$. Notons qu'en particulier l'exclusion du premier cas ne permet pas de comparer nos résultats avec ceux décrits dans les thèses de Jaouen [58] et de Perrier [85] ou encore les articles de Helluy [46], Helluy et Seguin [48] ;

absence de point critique : contrairement aux changements de phase réels, avec ce choix de lois d'état on ne peut jamais obtenir de point critique ; en effet dans la modélisation du chapitre 2 aucune hypothèse a été faite pour garantir l'existence d'un point critique ;

isotherme et isentropes : comme prévu au chapitre 3, on a une discontinuité de la vitesse du son qui implique une perte de convexité des courbes isentropes ainsi que des courbes isothermes à la traversée de la courbe de rosée.



Annexe 5.A Cas limites avec l'équation des gaz parfaits

On a vu que pour avoir un changement de phase du premier ordre il faut assurer la discontinuité des volumes, des énergies internes et des entropies molaires à travers la courbe de coexistence. Pour cela on a donc considéré deux lois d'état de type gaz parfait telles que $c_{v_1} \neq c_{v_2}$, $c_{v_1}\Gamma_1 \neq c_{v_2}\Gamma_2$ et $c_{v_1}\gamma_1 \neq c_{v_2}\gamma_2$. Toutefois, dans un certain nombre d'articles traitant les transitions de phase liquide-vapeur, les lois d'état utilisées comme exemple ne satisfont pas cette hypothèse. Afin donc de voir ce que

la renonciation à ces contraintes implique sur la loi de changement de phase, nous analysons par la suite séparément les trois cas «limites» :

- ❶ $c_{v_1} = c_{v_2}, \gamma_1 \neq \gamma_2$: $\varepsilon_1^* = \varepsilon_2^*, \tau_1^* \neq \tau_2^*, s_1^* \neq s_2^*$;
- ❷ $c_{v_1} \neq c_{v_2}, c_{v_1} \gamma_1 = c_{v_2} \gamma_2$: $\varepsilon_1^* \neq \varepsilon_2^*, \tau_1^* = \tau_2^*, s_1^* \neq s_2^*$;
- ❸ $c_{v_1} \neq c_{v_2}, c_{v_1} \gamma_1 = c_{v_2} \gamma_2$: $\varepsilon_1^* \neq \varepsilon_2^*, \tau_1^* \neq \tau_2^*, s_1^* = s_2^*$.

5.A.1 Calcul de la loi de changement de phase

Dans cette section nous regardons l'allure de la zone de coexistence. Avant de passer aux calculs, on donne déjà les résultats les plus significatifs.

Soit $\mathbf{w} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, \varepsilon)$ un état de mélange à l'équilibre et soient $(\mathbf{w}_\alpha^*, s^{\text{eq}}(\mathbf{w}_\alpha^*))$ les extrémités du segment r_{12} auquel il appartient. Alors, de même que pour le théorème 3.1 à la page 79, on vérifiera que pour tout état de mélange à l'équilibre le segment r_{12} existe et est unique et on appellera $(\mathbf{w}_\alpha^*, s_\alpha^*)$ les extrémités de ce segment.

À un état \mathbf{w} de coexistence donné, en résolvant le système $(P, T, g)(\mathbf{w}_1^*) = (P, T, g)(\mathbf{w}_2^*)$, on obtient le segment r_{12} auquel il appartient et on a la situation suivante :

cas général : $\forall \mathbf{w} \in r_{12}$ on a (P, T, g) constantes et τ, ε, s strictement croissantes,

la plage de coexistence est donnée par l'ensemble de ces segments ;

cas ❶ : $\forall \mathbf{w} \in r_{12}$ on a (P, T, g, ε) constantes,

les différents r_{12} sont parallèles,

la plage de coexistence est une bande parallèle à l'axe des ε ;

cas ❷ : $\forall \mathbf{w} \in r_{12}$ on a (P, T, g, τ) constantes,

les différents r_{12} sont parallèles,

la plage de coexistence est une bande parallèle à l'axe des τ ;

cas ❸ : l'entropie étant constante dans la zone de coexistence, on ne peut pas construire

l'enveloppe concave du $\max\{s_1, s_2\}$. Toutefois, si on considère la fonction $(\tau, s) \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$, on retrouve le même phénomène que dans les cas précédents, c'est-à-dire :

les différents segments \hat{r}_{12} sont parallèles,

la plage de coexistence est une bande parallèle à l'axe des s .

Passons maintenant aux calculs :

Cas ❶ : $c_{v_1} = c_{v_2}$ avec $\gamma_1 \neq \gamma_2$

Soit $\mathbf{w} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, \varepsilon)$ un état de coexistence donné et soit $(\mathbf{w}_\alpha^*, s^{\text{eq}}(\mathbf{w}_\alpha^*))$ les extrémités du segment r_{12} auquel il appartient. Alors, de même que pour le théorème 3.1 à la page 79, le segment r_{12} est unique et on appelle $(\mathbf{w}_\alpha^*, s_\alpha^*)$ les extrémités de ce segment. En résolvant le système $(P, T, g)(\mathbf{w}_1^*) = (P, T, g)(\mathbf{w}_2^*)$ on obtient

$$\tau_1^* = \exp(1) \left(\frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} \right)^{\frac{\Gamma_2}{\Gamma_2 - \Gamma_1}}, \quad (5.15a)$$

$$\tau_2^* = \exp(1) \left(\frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} \right)^{\frac{\Gamma_1}{\Gamma_2 - \Gamma_1}}, \quad (5.15b)$$

$$\varepsilon_1^* = \varepsilon_2^* = \varepsilon, \quad (5.15c)$$

$$s_1^* = c_v \left(\Gamma_1 + \ln \left(\varepsilon \left(\frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} \right)^{\frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\Gamma_2 - \Gamma_1}} \right) \right), \quad (5.15d)$$

$$s_2^* = c_v \left(\Gamma_2 + \ln \left(\varepsilon \left(\frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} \right)^{\frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\Gamma_2 - \Gamma_1}} \right) \right). \quad (5.15e)$$

On remarque donc que tout état $\mathbf{w} \in \tau_{12}$ a la même valeur de ε : le segment est parallèle à l'axe des τ , donc le long de τ_{12} on a (P, T, g, ε) constantes. Pour les sauts à travers la courbe de coexistence, en posant $\Delta \tau_\alpha^* \stackrel{\text{def}}{=} \tau_1^* - \tau_2^*$, on a

$$\Delta \tau_\alpha^* = \exp(1) \left(\frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} \right)^{\frac{\Gamma_2}{\Gamma_2 - \Gamma_1}} \left(1 - \left(\frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} \right)^{\frac{\Gamma_2}{\Gamma_2}} \right), \quad (5.15f)$$

$$\Delta \varepsilon_\alpha^* = 0, \quad (5.15g)$$

$$\Delta s_\alpha^* = c_v(\gamma_1 - \gamma_2). \quad (5.15h)$$

Donc si $\alpha = 1$ correspond à la phase liquide et $\alpha = 2$ correspond à la phase vapeur, il faut que $\Delta \tau_\alpha^* < 0$ et $\Delta s_\alpha^* < 0$ donc que

$$\gamma_1 < \gamma_2.$$

En ce qui concerne les fractions de masse, de volume et d'énergie on a

$$y^* = \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1 - \Gamma_2} \left(\frac{\tau}{\exp(1)} \left(\frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} \right)^{\frac{\Gamma_1}{\Gamma_1 - \Gamma_2}} - 1 \right), \quad (5.15i)$$

$$z^* = y^* \frac{\tau_1^*}{\tau} = \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1 - \Gamma_2} \left(1 - \frac{\exp(1)}{\tau} \left(\frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} \right)^{\frac{\Gamma_1}{\Gamma_1 - \Gamma_2}} \right), \quad (5.15j)$$

$$\psi^* = y^* = \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1 - \Gamma_2} \left(\frac{\tau}{\exp(1)} \left(\frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} \right)^{\frac{\Gamma_1}{\Gamma_1 - \Gamma_2}} - 1 \right). \quad (5.15k)$$

Cas ② : $c_{v1} \neq c_{v2}$ avec $c_{v1}\Gamma_1 = c_{v2}\Gamma_2$

Soit $\mathbf{w} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, \varepsilon)$ un état de coexistence et soit $(\mathbf{w}_\alpha^*, s^{\text{eq}}(\mathbf{w}_\alpha^*))$ les extrémités du segment τ_{12} auquel il appartient. Alors, de même que pour le théorème 3.1 à la page 79, le segment τ_{12} est unique et on appelle $(\mathbf{w}_\alpha^*, s_\alpha^*)$ les extrémités de ce segment. En résolvant le système $(P, T, g)(\mathbf{w}_1^*) = (P, T, g)(\mathbf{w}_2^*)$ on obtient

$$\tau_1^* = \tau_2^* = \tau, \quad (5.16a)$$

$$\varepsilon_1^* = \exp(1) \left(\frac{c_{v1}}{c_{v2}} \right)^{\frac{c_{v2}}{c_{v2} - c_{v1}}}, \quad (5.16b)$$

$$\varepsilon_2^* = \exp(1) \left(\frac{c_{v1}}{c_{v2}} \right)^{\frac{c_{v1}}{c_{v2} - c_{v1}}}, \quad (5.16c)$$

$$s_1^* = c_{v_1} + \frac{c_{v_1} c_{v_2}}{c_{v_2} - c_{v_1}} \ln \left(\frac{c_{v_1}}{c_{v_2}} \right) + c_v \Gamma \ln(\tau), \quad (5.16d)$$

$$s_2^* = c_{v_2} + \frac{c_{v_1} c_{v_2}}{c_{v_2} - c_{v_1}} \ln \left(\frac{c_{v_1}}{c_{v_2}} \right) + c_v \Gamma \ln(\tau). \quad (5.16e)$$

On remarque donc que tout état $\mathbf{w} \in \tau_{12}$ a la même valeur de τ : le segment est parallèle à l'axe des ε , donc le long de τ_{12} on a (P, T, g, τ) constantes. Pour les sauts à travers la courbe de coexistence, en posant $\Delta \mathbf{w}_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{w}_1^* - \mathbf{w}_2^*$, on a

$$\Delta \tau_\alpha^* = 0, \quad (5.16f)$$

$$\Delta \varepsilon_\alpha^* = \exp(1) \left(\frac{c_{v_1}}{c_{v_2}} \right)^{\frac{c_{v_2}}{c_{v_2} - c_{v_1}}} \left(1 - \frac{c_{v_2}}{c_{v_1}} \right), \quad (5.16g)$$

$$\Delta s_\alpha^* = c_{v_1} - c_{v_2}. \quad (5.16h)$$

Donc si $\alpha = 1$ correspond à la phase liquide et $\alpha = 2$ correspond à la phase vapeur, il faut que $\Delta \varepsilon_\alpha^* < 0$ et $\Delta s_\alpha^* < 0$ donc que

$$c_{v_1} < c_{v_2},$$

ce qui implique, puisque $c_{v_1} \Gamma_1 = c_{v_2} \Gamma_2$,

$$\gamma_1 > \gamma_2.$$

En ce qui concerne les fractions de masse, de volume et d'énergie on a

$$y^* = \frac{\varepsilon - \exp(1) \left(\frac{c_{v_1}}{c_{v_2}} \right)^{\frac{c_{v_1}}{c_{v_2} - c_{v_1}}}}{\exp(1) \left(\frac{c_{v_1}}{c_{v_2}} \right)^{\frac{c_{v_2}}{c_{v_2} - c_{v_1}}} \left(1 - \frac{c_{v_2}}{c_{v_1}} \right)}, \quad (5.16i)$$

$$z^* = y^* = \frac{\varepsilon - \exp(1) \left(\frac{c_{v_1}}{c_{v_2}} \right)^{\frac{c_{v_1}}{c_{v_2} - c_{v_1}}}}{\exp(1) \left(\frac{c_{v_1}}{c_{v_2}} \right)^{\frac{c_{v_2}}{c_{v_2} - c_{v_1}}} \left(1 - \frac{c_{v_2}}{c_{v_1}} \right)}, \quad (5.16j)$$

$$\psi^* = y^* \frac{\varepsilon_1^*}{\varepsilon} = \frac{1 - \frac{\exp(1)}{\varepsilon} \left(\frac{c_{v_1}}{c_{v_2}} \right)^{\frac{c_{v_1}}{c_{v_2} - c_{v_1}}}}{1 - \frac{c_{v_2}}{c_{v_1}}}. \quad (5.16k)$$

Cas ③ : $c_{v_1} \neq c_{v_2}$ avec $c_{v_1} \gamma_1 = c_{v_2} \gamma_2$

Soit $\widehat{\mathbf{w}} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, s)$ un état de coexistence et soit $(\widehat{\mathbf{w}}_\alpha^*, \varepsilon^{\text{eq}}(\widehat{\mathbf{w}}_\alpha^*))$ les extrémités du segment $\widehat{\tau}_{12}$ auquel il appartient. Alors, de même que pour le théorème 3.3 à la page 87, le segment $\widehat{\tau}_{12}$ est unique et on appelle $(\widehat{\mathbf{w}}_\alpha^*, \varepsilon_\alpha^*)$ les extrémités de ce segment. En résolvant le système $(P, T, g)(\widehat{\mathbf{w}}_1^*) = (P, T, g)(\widehat{\mathbf{w}}_2^*)$, en posant

$$\mathfrak{D} \stackrel{\text{def}}{=} \left(\frac{\gamma_2^{\gamma_2} \Gamma_1^{\Gamma_2}}{\gamma_1^{\gamma_1} \Gamma_2^{\Gamma_2}} \right)^{c_{v_1} \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_2}},$$

on obtient

$$\tau_1^* = \frac{1}{\mathfrak{D}\gamma_1}\varepsilon + \frac{\Gamma_1}{\gamma_1}\tau, \quad (5.17a)$$

$$\tau_2^* = \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1\mathfrak{D}\gamma_2}\varepsilon + \frac{\Gamma_2}{\gamma_2}\tau, \quad (5.17b)$$

$$\varepsilon_1^* = \frac{1}{\gamma_1}\varepsilon + \frac{\Gamma_1}{\gamma_1}\mathfrak{D}\tau, \quad (5.17c)$$

$$\varepsilon_2^* = \frac{1}{\gamma_2}\varepsilon + \frac{\Gamma_1}{\gamma_2}\mathfrak{D}\tau, \quad (5.17d)$$

$$s_1^* = s_2^* = s. \quad (5.17e)$$

On remarque donc que tout état $\widehat{\mathbf{w}} \in \widehat{\mathfrak{t}}_{12}$ a la même valeur de s : le segment est parallèle à l'axe des s , donc le long de $\widehat{\mathfrak{t}}_{12}$ on a (P, T, g, s) constantes. Pour les sauts à travers la courbe de coexistence, en posant $\Delta\mathfrak{s}_\alpha^* \stackrel{\text{def}}{=} \mathfrak{s}_1^* - \mathfrak{s}_2^*$, on a

$$\Delta\tau_\alpha^* = \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_1\gamma_2\Gamma_1}\frac{\varepsilon}{\mathfrak{D}} + \tau, \quad (5.17f)$$

$$\Delta\varepsilon_\alpha^* = \left(\frac{1}{\gamma_1} - \frac{1}{\gamma_2}\right)(\varepsilon - \Gamma_1\mathfrak{D}\tau), \quad (5.17g)$$

$$\Delta s_\alpha^* = 0. \quad (5.17h)$$

Donc si $\alpha = 1$ correspond à la phase liquide et $\alpha = 2$ correspond à la phase vapeur, il faut que $\Delta\tau_\alpha^* < 0$ et $\Delta\varepsilon_\alpha^* < 0$ donc que

$$c_{v1} < c_{v2},$$

ce qui implique, puisque $c_{v1}\gamma_1 = c_{v2}\gamma_2$,

$$\gamma_1 > \gamma_2.$$

En ce qui concerne les fractions de masse, de volume et d'énergie on a

$$y^* = \frac{\gamma_1\Gamma_1\mathfrak{D}\tau - \gamma_1\Gamma_2\varepsilon}{\gamma_1\gamma_2\Gamma_1\mathfrak{D}\tau + (\gamma_1 - \gamma_2)\varepsilon}, \quad (5.17i)$$

$$z^* = y^* \frac{\tau_1^*}{\tau}, \quad (5.17j)$$

$$\psi^* = y^* \frac{\varepsilon_1^*}{\varepsilon}. \quad (5.17k)$$

5.A.2 Propriétés de la loi de changement de phase

Dans cette section nous regardons les expressions de la courbe de coexistence et la structure de la matrice hessienne. Avant de passer aux calculs on donne déjà les résultats les plus significatifs.

L'équation de la courbe de coexistence, qui dans le cas général s'écrit sous la forme $T \mapsto P = \mathfrak{A}T^{1-B}$, dégénère en les formes suivantes :

Cas ❶ : $T \mapsto P = \mathfrak{A}T$,

Cas ❷ : $T = \mathfrak{B}$ constante,

Cas ❸ : $P = \mathfrak{C}$ constante.

Pour ce qui est de la matrice hessienne de l'entropie $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ ou de l'énergie $\widehat{\mathbf{w}} \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$ on aura, pour tout état de mélange à l'équilibre, les inégalité suivantes

cas ❶ : $s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} < 0$, $s_{\tau\tau}^{\text{eq}} = 0$, $s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}} = 0$;

cas ❷ : $s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} = 0$, $s_{\tau\tau}^{\text{eq}} < 0$, $s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}} = 0$;

cas ❸ : $\varepsilon_{ss}^{\text{eq}} > 0$, $\varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}} = 0$, $\varepsilon_{s\tau}^{\text{eq}} = 0$;

tandis que dans le cas général on rappelle qu'on a le théorème 3.1 à la page 79 qui affirme que

$$s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} < 0, \quad s_{\tau\tau}^{\text{eq}} < 0, \quad s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}} > 0 \quad \text{et} \quad s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} s_{\tau\tau}^{\text{eq}} = (s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}})^2,$$

ou le théorème équivalente 3.3 à la page 87 qui affirme que

$$\varepsilon_{ss}^{\text{eq}} > 0, \quad \varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}} > 0, \quad \varepsilon_{s\tau}^{\text{eq}} < 0 \quad \text{et} \quad \varepsilon_{ss}^{\text{eq}} \varepsilon_{\tau\tau}^{\text{eq}} = (\varepsilon_{s\tau}^{\text{eq}})^2.$$

Passons maintenant aux calculs :

Cas ❶ : $c_{v_1} = c_{v_2}$ avec $\gamma_1 \neq \gamma_2$

La courbe de coexistence a équation

$$T \mapsto p^{\text{sat}} = \mathfrak{A} T \quad \text{avec} \quad \mathfrak{A} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{c_v}{\exp(1)} \left(\frac{\Gamma_1^{\Gamma_1}}{\Gamma_2^{\Gamma_2}} \right)^{\frac{1}{\Gamma_1 - \Gamma_2}}. \quad (5.18a)$$

La relation de Clapeyron s'écrit

$$\frac{dp^{\text{sat}}}{dT} = \frac{s_1^* - s_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*} \stackrel{(\varepsilon_1^* = \varepsilon_2^*)}{=} \frac{p^{\text{sat}}}{T} = \mathfrak{A}.$$

La température T et la pression P ont pour équations

$$\mathbf{w} \mapsto T = \begin{cases} T_1 = \frac{\varepsilon}{c_v}, \\ T_{12} = \frac{\varepsilon}{c_v}, \\ T_2 \frac{\varepsilon}{c_v}; \end{cases} \quad (5.18b)$$

$$\mathbf{w} \mapsto P = \begin{cases} P_1 = \Gamma_1 \frac{\varepsilon}{\tau}, \\ P_{12} = \frac{\mathfrak{A}}{c_v} \varepsilon, \\ P_2 = \Gamma_2 \frac{\varepsilon}{\tau}. \end{cases} \quad (5.18c)$$

Regardons enfin les propriétés globales de l'entropie : pour tout état $\mathbf{w} \in \mathcal{C}$ (donc

monophasique ou mélange) on a

$$\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}} = \begin{cases} s_\alpha = c_v \ln(\varepsilon \tau^{\Gamma_\alpha}) & \mathbf{w} \text{ état monophasique,} \\ s_{12} = (s_1^* - s_2^*)y^* + s_2^* = & \mathbf{w} \text{ état de coexistence.} \\ = c_v \left(\frac{\tau \Gamma_2}{\exp(1)} \left(\frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} \right)^{\frac{\Gamma_1}{\Gamma_1 - \Gamma_2}} + \ln \left(\varepsilon \left(\frac{\Gamma_1}{\Gamma_2} \right)^{\frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\Gamma_2 - \Gamma_1}} \right) \right) \end{cases} \quad (5.18d)$$

Le gradient de l'entropie $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$, donné par $[1/T^{\text{eq}}, P^{\text{eq}}/T^{\text{eq}}]$, s'écrit donc

$$\mathbf{w} \mapsto \mathbf{grad} s^{\text{eq}} = \begin{bmatrix} s_\varepsilon^{\text{eq}} \\ s_\tau^{\text{eq}} \end{bmatrix} = \begin{cases} \begin{bmatrix} c_v/\varepsilon \\ c_v \Gamma_\alpha/\tau \end{bmatrix} & \mathbf{w} \text{ état monophasique,} \\ \begin{bmatrix} c_v/\varepsilon \\ \mathfrak{A} \end{bmatrix} & \mathbf{w} \text{ état de coexistence.} \end{cases} \quad (5.18e)$$

La matrice hessienne devient alors

$$\mathbf{w} \mapsto d^2 s^{\text{eq}} = \begin{cases} \begin{bmatrix} -c_v/\varepsilon^2 & 0 \\ 0 & -c_v \Gamma_\alpha/\tau^2 \end{bmatrix} & \mathbf{w} \text{ état monophasique,} \\ \begin{bmatrix} -c_v/\varepsilon^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & \mathbf{w} \text{ état de coexistence.} \end{cases} \quad (5.18f)$$

Cas ② : $c_{v_1} \neq c_{v_2}$ avec $c_{v_1} \Gamma_1 = c_{v_2} \Gamma_2$

L'équation de la courbe de coexistence $T \mapsto p^{\text{sat}}$ dégénère en une droite $T = \mathfrak{B}$ constante avec

$$\mathfrak{B} \stackrel{\text{def}}{=} \exp(1) \left(\frac{c_{v_1}}{c_{v_2}} \right)^{\frac{1}{c_{v_2} - c_{v_1}}} \quad (5.19a)$$

et on remarque que

$$\frac{\mathfrak{B}}{\exp(1)} = (\varepsilon_1^*)^{1/c_{v_2}} = (\varepsilon_2^*)^{1/c_{v_1}}.$$

La température T et la pression P ont équations

$$\mathbf{w} \mapsto T = \begin{cases} T_1 = \frac{\varepsilon}{c_{v_1}}, \\ T_{12} = \mathfrak{B}, \\ T_2 = \frac{\varepsilon}{c_{v_2}}; \end{cases} \quad (5.19b)$$

$$\mathbf{w} \mapsto P = \begin{cases} P_1 = \Gamma_1 \frac{\varepsilon}{\tau}, \\ P_{12} = \Gamma_1 \frac{\varepsilon_1^*}{\tau} = \Gamma_2 \frac{\varepsilon_2^*}{\tau} = \left(\frac{c_{v_1}}{c_{v_2}} \right)^{\frac{c_{v_2}}{c_{v_2} - c_{v_1}}} \frac{\Gamma_1}{\tau}, \\ P_2 = \Gamma_2 \frac{\varepsilon}{\tau}. \end{cases} \quad (5.19c)$$

Regardons enfin les propriétés globales de l'entropie : pour tout état $\mathbf{w} \in \mathcal{C}$ (donc monophasique ou mélange) on a

$$\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}} = \begin{cases} s_\alpha = c_{v\alpha} \ln(\varepsilon \tau^{\Gamma_\alpha}) & \mathbf{w} \text{ état monophasique,} \\ s_{12} = (s_1^* - s_2^*)y^* + s_2^* = & \mathbf{w} \text{ état de coexistence.} \\ \varepsilon - \exp(1) \left(\frac{c_{v1}}{c_{v2}} \right)^{\frac{c_{v1}}{c_{v2} - c_{v1}}} & \\ = \frac{\exp(1) \left(\frac{c_{v1}}{c_{v2}} \right)^{\frac{c_{v2}}{c_{v2} - c_{v1}}} \left(\frac{c_{v1}}{c_{v2}} - 1 \right)}{+} & \\ + c_{v2} + \frac{c_{v1} c_{v2}}{c_{v2} - c_{v1}} \ln \left(\frac{c_{v1}}{c_{v2}} \right) + c_v \Gamma \ln(\tau) & \end{cases} \quad (5.19d)$$

Donc le gradient de l'entropie $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$, donné par $[1/T^{\text{eq}}, P^{\text{eq}}/T^{\text{eq}}]$, s'écrit

$$\mathbf{w} \mapsto \mathbf{grad} s^{\text{eq}} = \begin{bmatrix} s_\varepsilon^{\text{eq}} \\ s_\tau^{\text{eq}} \end{bmatrix} = \begin{cases} \begin{bmatrix} c_{v\alpha}/\varepsilon \\ c_v \Gamma/\tau \end{bmatrix} & \mathbf{w} \text{ état monophasique,} \\ \begin{bmatrix} 1/\mathfrak{B} \\ c_v \Gamma/\tau \end{bmatrix} & \mathbf{w} \text{ état de coexistence,} \end{cases} \quad (5.19e)$$

et on obtient la matrice hessienne

$$\mathbf{w} \mapsto d^2 s^{\text{eq}} = \begin{cases} \begin{bmatrix} -c_v/\varepsilon^2 & 0 \\ 0 & -c_v \Gamma/\tau^2 \end{bmatrix} & \mathbf{w} \text{ état monophasique,} \\ \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -c_v \Gamma/\tau^2 \end{bmatrix} & \mathbf{w} \text{ état de coexistence.} \end{cases} \quad (5.19f)$$

Cas ③ : $c_{v1} \neq c_{v2}$ avec $c_{v1} \gamma_1 = c_{v2} \gamma_2$

L'équation de la courbe de coexistence $T \mapsto p^{\text{sat}}$ dégénère en une droite $P = \mathfrak{C}$ constante avec

$$\mathfrak{C} \stackrel{\text{def}}{=} \left(\frac{\Gamma_2}{(\gamma_1 - \gamma_2)^{\gamma_2}} \right)^{\frac{\gamma_1}{\gamma_1 - \gamma_2}}. \quad (5.20a)$$

Dans ce cas, on ne peut pas définir une entropie dans la zone de coexistence par l'enveloppe concave de l'entropie de mélange sans changement de phase. En fait, on doit travailler avec la fonction $\hat{\mathbf{w}} \mapsto \varepsilon^{\text{eq}}$.

La température T et la pression P ont alors pour équations

$$\hat{\mathbf{w}} \mapsto T = \begin{cases} T_1 = \frac{\varepsilon(\hat{\mathbf{w}})}{c_{v1}}, \\ T_{12} = \frac{\mathfrak{C}}{\mathfrak{A}}, \\ T_2 = \frac{\varepsilon(\hat{\mathbf{w}})}{c_{v2}}; \end{cases} \quad (5.20b)$$

$$\widehat{\mathbf{w}} \mapsto \mathbf{P} = \begin{cases} p_1 = \Gamma_1 \frac{\varepsilon(\widehat{\mathbf{w}})}{\tau}, \\ p_{12} = \mathfrak{C}, \\ p_2 = \Gamma_2 \frac{\varepsilon(\widehat{\mathbf{w}})}{\tau}. \end{cases} \quad (5.20c)$$

Annexe 5.B Récapitulatif pour les gaz parfaits

Supposons que l'indice 1 correspond à la phase vapeur et l'indice 2 à la phase liquide.

Dans les tableaux qui suivent on résume les études sur les gaz parfaits en comparant les trois cas «limites» avec le cas général.

Soit $\mathbf{w} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, \varepsilon)$ ou $\hat{\mathbf{w}} \stackrel{\text{def}}{=} (\tau, s)$ un état de mélange à l'équilibre.

Dans ce premier tableau on étudie les extrémités du segment τ_{12} (resp. $\hat{\tau}_{12}$) auquel l'état \mathbf{w} (resp. $\hat{\mathbf{w}}$) appartient (cf. théorèmes 3.1 à la page 79 et 3.3 à la page 87). On remarque que

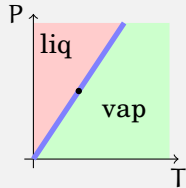
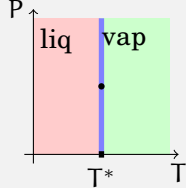
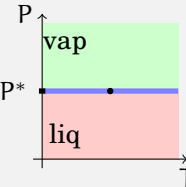
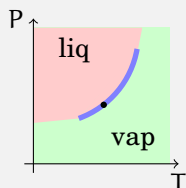
- ☞ dans le cas ❶ le segment τ_{12} est parallèle à l'axe des ε (il est iso-énergétique),
- ☞ dans le cas ❷ le segment τ_{12} est parallèle à l'axe des τ (il est isochore),
- ☞ dans le cas ❸ le segment est parallèle au plan (τ, ε) (il est isentropique).

	❶ $c_{v1} = c_{v2},$ $\gamma_1 \neq \gamma_2$	❷ $c_{v1} \neq c_{v2},$ $c_{v1}\Gamma_1 = c_{v2}\Gamma_2$	❸ $c_{v1} \neq c_{v2},$ $c_{v1}\gamma_1 = c_{v2}\gamma_2$	❹ $c_{v1} \neq c_{v2},$ $c_{v1}\Gamma_1 \neq c_{v2}\Gamma_2,$ $c_{v1}\gamma_1 \neq c_{v2}\gamma_2$
$\tau_1^* =$	cst.	τ	fct(τ, ε)	fct(τ, ε)
$\tau_2^* =$	cst.	τ	fct(τ, ε)	fct(τ, ε)
$\varepsilon_1^* =$	ε	cst.	$c_{v1}T^*$	fct(τ, ε)
$\varepsilon_2^* =$	ε	cst.	$c_{v2}T^*$	fct(τ, ε)
$s_1^* =$	fct(ε)	fct(τ)	s	fct(τ, ε)
$s_2^* =$	fct(ε)	fct(τ)	s	fct(τ, ε)

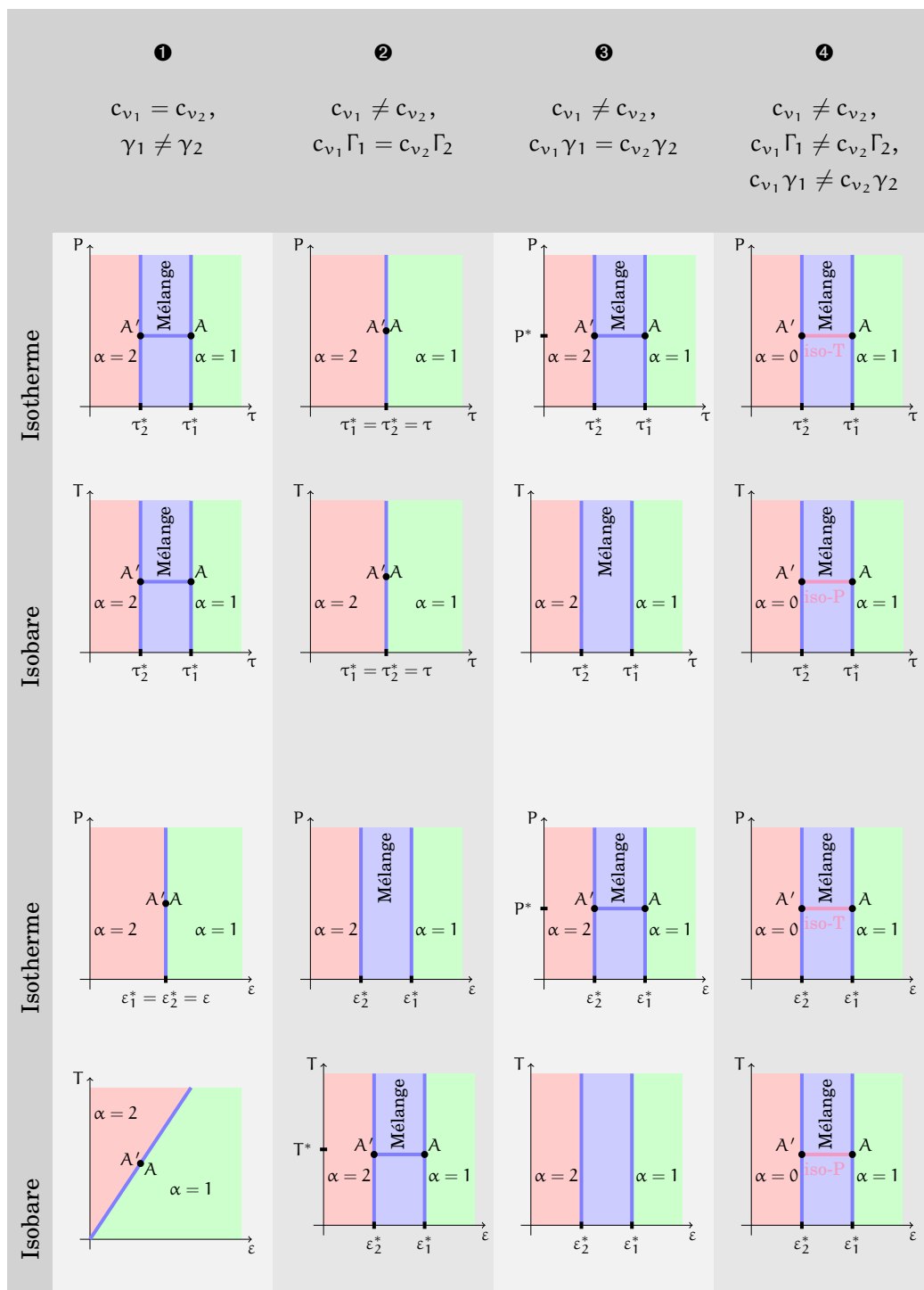
Dans ce tableau on regarde maintenant les fractions de volume y , de masse z et d'énergie ψ .

	$y^* =$	$z^* =$	$\psi^* =$
1 $c_{v1} = c_{v2},$ $\gamma_1 \neq \gamma_2$	$\frac{\tau - \tau_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*} = \frac{s - s_2^*}{s_1^* - s_2^*}$	$y^* \frac{\tau_1^*}{\tau}$	y^*
2 $c_{v1} \neq c_{v2},$ $c_{v1} \Gamma_1 = c_{v2} \Gamma_2$	$\frac{\varepsilon - \varepsilon_2^*}{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*} = \frac{s - s_2^*}{s_1^* - s_2^*}$	y^*	$y^* \frac{\varepsilon_1^*}{\varepsilon}$
3 $c_{v1} \neq c_{v2},$ $c_{v1} \gamma_1 = c_{v2} \gamma_2$	$\frac{\tau - \tau_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_2^*}{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}$	$y^* \frac{\tau_1^*}{\tau}$	$y^* \frac{\varepsilon_1^*}{\varepsilon}$
4 $c_{v1} \neq c_{v2},$ $c_{v1} \Gamma_1 \neq c_{v2} \Gamma_2,$ $c_{v1} \gamma_1 \neq c_{v2} \gamma_2$	$\frac{\tau - \tau_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_2^*}{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*} = \frac{s - s_2^*}{s_1^* - s_2^*}$	$y^* \frac{\tau_1^*}{\tau}$	$y^* \frac{\varepsilon_1^*}{\varepsilon}$

On regarde maintenant les équations d'état incomplètes $\mathbf{w} \mapsto P$ et $\mathbf{w} \mapsto T$ et la courbe de saturation $T \mapsto P$.

	P_{12}	T_{12}	$T \mapsto P$ Courbe de coexistence
① $c_{v1} = c_{v2},$ $\gamma_1 \neq \gamma_2$	fct(ε)	fct(ε)	
② $c_{v1} \neq c_{v2},$ $c_{v1} \Gamma_1 = c_{v2} \Gamma_2$	fct(τ)	cst.	
③ $c_{v1} \neq c_{v2},$ $c_{v1} \gamma_1 = c_{v2} \gamma_2$	cst.	$\beta \tau_1^*$	
④ $c_{v1} \neq c_{v2},$ $c_{v1} \Gamma_1 \neq c_{v2} \Gamma_2,$ $c_{v1} \gamma_1 \neq c_{v2} \gamma_2$	fct(τ, ε)	fct(τ, ε)	

Enfin on regarde les isothermes et les isobares dans les plans (τ, P) , (τ, T) , (ε, P) et (ε, T) . On remarque que dans tous les quatre cas il n'y a pas de point critique et, pour les trois cas dégénérés ❶, ❷ et ❸ les courbe de saturation sont parallèles.



CHAPITRE 6

Stiffened Gas

6.1 Loi d'état d'une phase pure	160
6.2 Loi de changement de phase	163
6.3 Cas simplifié : $q_{\text{liq}} = q_{\text{vap}} = 0$	165
6.3.1 Loi de changement de phase	165
6.4 Cas général	170
6.4.1 Loi de changement de phase	170
6.5 Vitesse du son	172
6.6 Dérivée fondamentale	174
6.7 Premier exemple : eau liquide et vapeur d'eau	176
6.7.1 Courbe de coexistence	176
6.7.2 Loi de changement de phase	177
6.7.3 Vitesse du son et dérivée fondamentale	181
6.8 Deuxième exemple : dodécane	185
6.8.1 Courbe de coexistence	185
6.9 Conclusion	186
Annexes	186
6.A Calcul des paramètres à partir de données expérimentales	186
6.B Comparaison avec les données expérimentales pour l'eau	189

Résumé

DANS CE CHAPITRE on introduit l'équation d'état *Stiffened Gas*. Avec une formulation minimale, elle contient l'essentiel des propriétés nécessaires à la traduction des effets attractifs et répulsifs des liquides et des gaz. Dans la première partie on donne les éléments constitutifs de cette loi d'état pour un fluide monophasique. On examine ensuite comment en déduire la loi de changement de phase. Cette loi est définie par une enveloppe concave ; on montre d'abord que ce problème peut être ramené à un système de deux équations en deux inconnues

qui définit l'équilibre entre les deux phases. On montre ensuite sous quelles conditions on peut simplifier ultérieurement ce système et, dans les cas pour lesquels cette simplification n'est plus possible, on propose une résolution approchée. On termine en présentant les calculs de la loi d'état de changement de phase pour deux fluides particuliers : l'eau et sa vapeur d'abord, le dodécane et sa vapeur ensuite. Le choix de ces fluides est lié à leur importance dans l'industrie, notamment pour la description des écoulement en changement de phase dans les réacteurs nucléaires pour le premier fluide et dans l'injection de carburant pour le deuxième. Les accords entre le calcul exact de la loi de changement de phase et le calcul approché sont excellents.

6.1. Loi d'état d'une phase pure

La loi d'état $(\tau, \varepsilon) \mapsto s$, sous l'approximation *stiffened gas*, peut être écrite sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} (\tau, \varepsilon) \mapsto s &\stackrel{\text{def}}{=} c_v \ln \left((\varepsilon - q - \pi\tau) \tau^{(\bar{\gamma}-1)} \right) + m = \\ &= c_v \ln(\varepsilon - q - \pi\tau) + c_v(\bar{\gamma} - 1) \ln \tau + m, \end{aligned}$$

où τ , ε et s sont respectivement le volume, l'énergie interne et l'entropie molaires du fluide tandis que les constantes c_v , $\bar{\gamma}$, q , π et m sont des coefficients traduisant les propriétés thermodynamiques du fluide. Cette loi est une forme linéarisée des équations d'état de type Mie-Grüneisen. Le coefficient q représente l'énergie de formation, le produit $(\bar{\gamma} - 1) \frac{(\varepsilon - q)}{\tau} > 0$ traduit un effet répulsif lié à l'agitation moléculaire et le produit $\bar{\gamma}\pi > 0$ traduit les effets d'attraction moléculaires garantissant la cohésion de la matière à l'état liquide ou solide (c'est pourquoi on suppose souvent $\pi = 0$ pour un gaz). Pour plus de détails voir la thèse de Le Metayer [65].

Il est usuel de supposer que c_v , π et $\bar{\gamma} - 1$ sont positifs.

On définit la température T , la pression P et l'enthalpie libre (ou potentiel de Gibbs) g classiquement à partir des dérivées premières de l'entropie

$$(\tau, \varepsilon) \mapsto \begin{cases} \frac{1}{T} \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial s}{\partial \varepsilon} \right|_{\tau} = \frac{c_v}{(\varepsilon - q - \pi\tau)}, \\ \frac{P}{T} \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_{\varepsilon} = -\frac{\pi c_v}{\varepsilon - q - \pi\tau} + \frac{c_v(\bar{\gamma} - 1)}{\tau}, \\ h \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon + P\tau, \\ g \stackrel{\text{def}}{=} h - Ts \end{cases}$$

et on obtient

$$(\tau, \varepsilon) \mapsto \begin{cases} T = \frac{\varepsilon - q - \pi\tau}{c_v}, \\ P = \frac{\varepsilon - q - \pi\tau}{\tau}(\bar{\gamma} - 1) - \pi, \\ h = q + (\varepsilon - q - \pi\tau)\bar{\gamma}, \\ g = q + (\varepsilon - q - \pi\tau) \left(\bar{\gamma} - \frac{m}{c_v} - \ln \left((\varepsilon - q - \pi\tau)\tau^{(\bar{\gamma}-1)} \right) \right). \end{cases}$$

Ayant supposé $c_v > 0$, pour que la température soit positive on suppose aussi que $\varepsilon - q - \pi\tau$ est positif. Alors l'application $(\tau, \varepsilon) \mapsto s$ peut être inversée et se réécrire sous la forme $(\tau, s) \mapsto \varepsilon$:

$$(\tau, s) \mapsto \varepsilon = \tau^{(1-\bar{\gamma})} \exp \left(\frac{s - m}{c_v} \right) + q + \pi\tau.$$

Grâce a cette propriété d'inversibilité on va réécrire les quantités précédentes en fonction des dérivées premières et secondes de $(\tau, s) \mapsto \varepsilon$ comme suit :

$$(\tau, s) \mapsto \begin{cases} T = \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} \right|_{\tau} = \frac{1}{c_v} \tau^{(1-\bar{\gamma})} \exp \left(\frac{s - m}{c_v} \right), \\ P = - \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} \right|_s = (\bar{\gamma} - 1) \tau^{-\bar{\gamma}} \exp \left(\frac{s - m}{c_v} \right) - \pi, \\ h = \varepsilon + P\tau = q + \bar{\gamma} \tau^{1-\bar{\gamma}} \exp \left(\frac{s - m}{c_v} \right), \\ g = h - Ts = q + \left(\bar{\gamma} - \frac{s}{c_v} \right) \tau^{1-\bar{\gamma}} \exp \left(\frac{s - m}{c_v} \right). \end{cases}$$

Vérifions maintenant que l'équation d'état remplit bien les consignes données aux chapitres 2 et 3 :

- ☛ hypothèse de monotonie (2.3) : nous avons déjà observé que, avec les hypothèses posées sur les paramètres, la température est positive ; pour que la pression aussi soit strictement positive il faut ajouter la condition

$$\frac{\varepsilon - q - \pi\tau}{\tau} = \tau^{-\bar{\gamma}} \exp \left(\frac{s - m}{c_v} \right) > \frac{\pi}{(\bar{\gamma} - 1)};$$

on voit que cette hypothèse limite les valeurs admissibles de (τ, ε) ;

- ☛ hypothèse de concavité (2.4) : pour que la matrice hessienne d^2s soit définie strictement négative dans le cône $\mathcal{C} \stackrel{\text{def}}{=} \{\tau > 0, \varepsilon > 0\}$ il faut que les inégalités suivantes soient vérifiées :

$$\begin{cases} s_{\varepsilon\varepsilon} < 0 & (\text{équival. } s_{\tau\tau} < 0), \\ s_{\varepsilon\varepsilon}s_{\tau\tau} > s_{\tau\varepsilon}^2. \end{cases}$$

Ayant supposé $(\varepsilon - q - \pi\tau) \neq 0$, $\pi > 0$, $c_v > 0$ et $\bar{\gamma} > 1$, on a

$$\begin{cases} s_{\varepsilon\varepsilon} = -\frac{c_v}{(\varepsilon - q - \pi\tau)^2}, \\ s_{\tau\tau} = -\left[\left(\frac{\pi}{\varepsilon - q - \pi\tau}\right)^2 + \frac{(\bar{\gamma} - 1)}{\tau^2}\right] c_v, \\ s_{\tau\varepsilon} = \frac{c_v\pi}{(\varepsilon - q - \pi\tau)^2}, \end{cases}$$

qui donnent

$$s_{\varepsilon\varepsilon} < 0, \quad s_{\tau\tau} < 0 \quad \text{et} \quad s_{\varepsilon\varepsilon}s_{\tau\tau} - s_{\tau\varepsilon}^2 = (\bar{\gamma} - 1) \left(\frac{c_v}{(\varepsilon - q - \pi\tau)\tau}\right)^2 > 0;$$

on remarque aussi que $s_{\tau\varepsilon} > 0$;

☞ hypothèse (3.1) : pour que les courbes isentropes ne s'intersectent pas on vérifie que $\varepsilon_{\tau s}$ est négatif :

$$\varepsilon_{\tau s} = -\frac{\bar{\gamma} - 1}{c_v} \tau^{-\bar{\gamma}} \exp\left(\frac{s - m}{c_v}\right) < 0;$$

☞ hypothèse (3.2) : la dérivée fondamentale \mathfrak{G} est positive car

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\tau\tau} &= (\bar{\gamma} - 1)\bar{\gamma}\tau^{-\bar{\gamma}-1} \exp\left(\frac{s - m}{c_v}\right) > 0, \\ \varepsilon_{\tau\tau\tau} &= -(\bar{\gamma}^2 - 1)\bar{\gamma} \exp\left(\frac{s - m}{c_v}\right) \tau^{-\bar{\gamma}-2} < 0, \\ \mathfrak{G} &\stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\tau}{2} \frac{\varepsilon_{\tau\tau\tau}}{\varepsilon_{\tau\tau}} = \frac{\bar{\gamma} + 1}{2} > 0. \end{aligned}$$

Divers coefficients, jouant un rôle plus ou moins important en fonction de l'application que l'on désire traiter, peuvent être calculés. En mécanique des fluides, où les équations aux dérivées partielles sont hyperboliques, le calcul de la vitesse du son dans le fluide est fondamental, car la propagation des ondes acoustiques dépend de la vitesse du son. On calcule donc le carré de la vitesse du son c^* et on vérifie qu'il est positif. Si on écrit le carré comme une fonction de τ et de s on trouve

$$(\tau, s) \mapsto (c^*)^2 \stackrel{\text{def}}{=} -\tau^2 \frac{\partial P}{\partial \tau} \Big|_s = \tau^2 \varepsilon_{\tau\tau} = \bar{\gamma}(\bar{\gamma} - 1)\tau^{1-\bar{\gamma}} \exp\left(\frac{s - m}{c_v}\right) > 0.$$

Par ailleurs, si on l'écrit comme une fonction de τ et de ε on a

$$(\tau, \varepsilon) \mapsto (c^*)^2 \stackrel{\text{def}}{=} \tau^2 \left(P \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} \Big|_\tau - \frac{\partial P}{\partial \tau} \Big|_\varepsilon \right) = \bar{\gamma}(\bar{\gamma} - 1)(\varepsilon - q - \pi\tau) = \bar{\gamma}(P + \pi)\tau > 0.$$

★ **REMARQUE 6.1.** Calculons les quantités adimensionnées de la définition 3.2 à la page 88 :

- ☞ exposant adiabatique $\gamma = \bar{\gamma} \left(1 + \frac{\pi}{P}\right)$,
- ☞ coefficient de Grüneisen $\Gamma = \bar{\gamma} - 1$,
- ☞ chaleur spécifique adimensionnée $g = \frac{(\bar{\gamma}-1)P}{P+\pi}$.

On voit ainsi que la vitesse du son ne dépend que de la température $(c^*)^2 = \bar{\gamma}\Gamma c_v T$. ❀

Avant d'introduire le changement de phase, on va réécrire l'équation d'état $(\tau, \varepsilon) \mapsto s$ (et ses dérivées) avec d'autres jeux de variables qui seront utiles par la suite :

❧ des variables (τ, ε) aux variables (τ, T) :

$$(\tau, T) \mapsto \begin{cases} s = c_v \ln(c_v T \tau^\Gamma) + m, \\ \varepsilon = c_v T + \pi \tau + q, \\ P = c_v \Gamma \frac{T}{\tau} - \pi, \\ h = q + \bar{\gamma} c_v T, \\ g = c_v T (\bar{\gamma} - \ln(c_v T \tau^\Gamma)) - Tm + q; \end{cases}$$

❧ des variables (τ, ε) aux variables (P, T) :

$$(P, T) \mapsto \begin{cases} s = c_v \bar{\gamma} \ln T - c_v \Gamma \ln(P + \pi) + m + c_v \bar{\gamma} \ln c_v + c_v \Gamma \ln \Gamma, \\ \varepsilon = c_v T \left(1 + \frac{\pi \Gamma}{P + \pi}\right) + q = c_v T \frac{P + \pi \bar{\gamma}}{P + \pi} + q, \\ \tau = c_v \Gamma \frac{T}{P + \pi}, \\ h = q + \bar{\gamma} c_v T, \\ g = c_v T \left(\bar{\gamma} - \ln \left((c_v T)^{\bar{\gamma}} \left(\frac{\Gamma}{P + \pi} \right)^\Gamma \right) \right) - Tm + q. \end{cases}$$

Dans certains ouvrages, comme par exemple Le Metayer [65], Le Metayer *et al.* [66], Saurel *et al.* [90], on trouve un coefficient q' qui, avec notre notation, correspond à $q' = m + c_v \bar{\gamma} \ln c_v + c_v \Gamma \ln \Gamma$. Par la suite on utilisera m ou q' indifféremment.

6.2. Loi de changement de phase

Dorénavant on considérera un fluide qui peut se présenter sous forme liquide ou vapeur et on supposera que les deux phases de ce fluide sont décrites par deux lois d'état de type *stiffened gas*. Autrement dit, pour $\alpha = \text{liq}$ ou vap , on considérera deux fonctions

$$(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \mapsto s_\alpha$$

vérifiant les propriétés ci-dessus écrites. On supposera de plus que ces deux lois d'état satisfont les hypothèses 2.3 à la page 35 pour les changements de phase du premier ordre, à savoir les deux lois d'état sont telles que, à saturation, les volumes, les énergies internes et les entropies molaires sont plus petites dans la phase liquide que dans la phase vapeur.

On a vu au chapitre 2 que la loi d'état de changement de phase $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$ est ainsi définie : pour tout couple $(\tau, \varepsilon) \in \mathcal{C}$,

❶ si $(\tau_{\text{liq}}^*, \varepsilon_{\text{liq}}^*, \tau_{\text{vap}}^*, \varepsilon_{\text{vap}}^*, y^*)$ est solution du système

$$\begin{cases} P_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = P_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) \end{cases} \quad (6.1a)$$

$$\begin{cases} T_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = T_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) \end{cases} \quad (6.1b)$$

$$\begin{cases} g_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = g_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) \end{cases} \quad (6.1c)$$

$$\begin{cases} \varepsilon = y \varepsilon_{\text{liq}} + (1 - y) \varepsilon_{\text{vap}} \end{cases} \quad (6.1d)$$

$$\begin{cases} \tau = y \tau_{\text{liq}} + (1 - y) \tau_{\text{vap}} \end{cases} \quad (6.1e)$$

et $y^* \in]0, 1[$ alors on pose

$$s^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = y^* s_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}^*, \varepsilon_{\text{liq}}^*) + (1 - y^*) s_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}^*, \varepsilon_{\text{vap}}^*);$$

❷ si le système (6.1) n'as pas de solution ou bien s'il y a des solutions mais y^* n'est pas dans l'ouvert $]0, 1[$ alors l'état (τ, ε) est un état monophasique et on choisit à quelle phase il appartient selon la règle suivante :

❶ si $s_{\text{liq}}(\tau, \varepsilon) > s_{\text{vap}}(\tau, \varepsilon)$ alors on pose $y^* = 1$, $\tau_{\text{liq}}^* = \tau$, $\varepsilon_{\text{liq}}^* = \varepsilon$ et

$$s^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = s_{\text{liq}}(\tau, \varepsilon),$$

(les valeurs de τ_{vap}^* et $\varepsilon_{\text{vap}}^*$ sont quelconques);

❷ si $s_{\text{liq}}(\tau, \varepsilon) < s_{\text{vap}}(\tau, \varepsilon)$ alors on pose $y^* = 0$, $\tau_{\text{vap}}^* = \tau$, $\varepsilon_{\text{vap}}^* = \varepsilon$ et

$$s^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = s_{\text{vap}}(\tau, \varepsilon),$$

(les valeurs de τ_{liq}^* et $\varepsilon_{\text{liq}}^*$ sont quelconques).

On va donc se concentrer sur la résolution du système (6.1). Pour cela on distingue deux cas

❶ cas simplifié : $q_{\text{liq}} = q_{\text{vap}} = 0$,

❷ cas général : $q_\alpha \neq 0$ pour au moins un α .

6.3. Cas simplifié : $q_{\text{liq}} = q_{\text{vap}} = 0$

Dans cette partie on étudie la loi de changement de phase lorsque les deux phases sont décrites par deux lois d'état de type *stiffened gas* avec la simplification $q_{\text{liq}} = q_{\text{vap}} = 0$.

6.3.1. Loi de changement de phase

Pour $(\tau, \varepsilon) \in \mathcal{C}$ donnés, il s'agit de trouver le quintuplé $(\tau_{\text{liq}}^*, \varepsilon_{\text{liq}}^*, \tau_{\text{vap}}^*, \varepsilon_{\text{vap}}^*, y^*)$ solution du système

$$\begin{cases} P_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = P_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) & (6.2a) \\ T_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = T_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) & (6.2b) \\ g_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = g_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) & (6.2c) \\ \varepsilon = y \varepsilon_{\text{liq}} + (1 - y) \varepsilon_{\text{vap}} & (6.2d) \\ \tau = y \tau_{\text{liq}} + (1 - y) \tau_{\text{vap}} & (6.2e) \end{cases}$$

avec y^* appartenant à l'intervalle ouverte $]0, 1[$.

La résolution de ce système peut être simplifiée si on utilise l'expression de la courbe de coexistence (ou de son inverse). En effet, à partir des relations (6.2a)-(6.2b) on écrit les volumes et les énergies internes en fonction d'une même pression P et d'une même température T :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\alpha}(T, P) &= c_{v\alpha} T \frac{P + \pi_{\alpha} \bar{\gamma}_{\alpha}}{P + \pi_{\alpha}} = c_{v\alpha} T \left(1 + \frac{\pi_{\alpha}(\bar{\gamma}_{\alpha} - 1)}{P + \pi_{\alpha}} \right), \\ \tau_{\alpha}(T, P) &= c_{v\alpha} \Gamma_{\alpha} \frac{T}{P + \pi_{\alpha}}, \end{aligned}$$

α étant liq ou vap. Ensuite, la combinaison de ces deux relations avec l'équation (6.2c) fournit une expression explicite de $P \mapsto T^{\text{sat}}$ (expression qu'on donnera au paragraphe suivant) et permet d'exprimer par conséquent les volumes et les énergies internes à saturation en fonction de la seule variable P :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\alpha}^{\text{sat}}(P) &\stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_{\alpha}(T^{\text{sat}}(P), P) = c_{v\alpha} T^{\text{sat}}(P) \frac{P + \pi_{\alpha} \bar{\gamma}_{\alpha}}{P + \pi_{\alpha}}, \\ \tau_{\alpha}^{\text{sat}}(P) &\stackrel{\text{def}}{=} \tau_{\alpha}(T^{\text{sat}}(P), P) = c_{v\alpha} \Gamma_{\alpha} \frac{T^{\text{sat}}(P)}{P + \pi_{\alpha}}. \end{aligned}$$

En injectant ces relations dans (6.2e) on trouve

$$y^{\text{sat}}(P) = \frac{\tau - \tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P) - \tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P)}.$$

Donc, en combinant le tout avec (6.2d), on trouve que la résolution du système (6.2) est réduite à la recherche (en générale numérique) de la solution de l'équation de changement de phase (voir définition 2.10 à la page 55) suivante

Équation de changement de phase

$$\frac{\tau - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)}{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)}$$

avec la contrainte $y^{\text{sat}}(P) \in]0, 1[$.

Courbe de coexistence Détaillons ici le calcul de la courbe de coexistence, calcul qu'on a vu être crucial pour l'établissement de la loi de changement de phase.

En écrivant l'égalité des potentiels chimiques $g_{\text{liq}}(P, T) = g_{\text{vap}}(P, T)$ en fonction de la pression et de la température, on obtient l'équation (implicite) de la courbe de coexistence $T \mapsto P^{\text{sat}}(T)$:

$$q_{\text{liq}} - T \{ m_{\text{liq}} + c_{v_{\text{liq}}} [\Gamma_{\text{liq}} \ln(P + \pi_{\text{liq}}) - \bar{\gamma}_{\text{liq}} \ln T + \bar{\gamma}_{\text{liq}}(1 - \ln c_{v_{\text{liq}}}) - \Gamma_{\text{liq}} \ln \Gamma_{\text{liq}}] \} = \\ = q_{\text{vap}} - T \{ m_{\text{vap}} + c_{v_{\text{vap}}} [\Gamma_{\text{vap}} \ln(P + \pi_{\text{vap}}) - \bar{\gamma}_{\text{vap}} \ln T + \bar{\gamma}_{\text{vap}}(1 - \ln c_{v_{\text{vap}}}) - \Gamma_{\text{vap}} \ln \Gamma_{\text{vap}}] \}.$$

Il est évident que si $q_{\text{liq}} = q_{\text{vap}} = 0$, on peut calculer la température en fonction de la pression ; en revanche, si au moins un des deux q_{α} est non nul, la relation entre P et T reste implicite.

En particulier, pour $q_{\text{liq}} = q_{\text{vap}} = 0$ on a deux cas possibles :

1. si $c_{v_{\text{liq}}} \bar{\gamma}_{\text{liq}} = c_{v_{\text{vap}}} \bar{\gamma}_{\text{vap}}$ alors l'équation $g_{\text{liq}}(P, T) = g_{\text{vap}}(P, T)$ fournit une pression P^{sat} constante qui vérifie la relation

$$\frac{(P^{\text{sat}} + \pi_{\text{liq}})^{c_{v_{\text{liq}}} \Gamma_{\text{liq}}}}{(P^{\text{sat}} + \pi_{\text{vap}})^{c_{v_{\text{vap}}} \Gamma_{\text{vap}}}} = \exp(m_{\text{liq}} - m_{\text{vap}}) \left(\frac{c_{v_{\text{liq}}} \Gamma_{\text{liq}}}{c_{v_{\text{vap}}} \Gamma_{\text{vap}}} \right)^{c_v \bar{\gamma}} \frac{\Gamma_{\text{vap}}^{c_{v_{\text{vap}}}}}{\Gamma_{\text{liq}}^{c_{v_{\text{liq}}}}}$$

(c'est une généralisation du cas $c_{v_1} \gamma_1 = c_{v_2} \gamma_2$ avec deux lois d'états de type gaz parfait polytropique) ;

2. si $c_{v_{\text{liq}}} \bar{\gamma}_{\text{liq}} \neq c_{v_{\text{vap}}} \bar{\gamma}_{\text{vap}}$, en résolvant $g_{\text{liq}}(P, T) = g_{\text{vap}}(P, T)$ on obtient une expression explicite de l'inverse de la courbe de coexistence :

$$P \mapsto T^{\text{sat}} = A \left[(P + \pi_{\text{liq}})^{c_{v_{\text{liq}}} \Gamma_{\text{liq}}} (P + \pi_{\text{vap}})^{-c_{v_{\text{vap}}} \Gamma_{\text{vap}}} \right]^{1/B}$$

où on a défini

$$A \stackrel{\text{def}}{=} \exp \left(1 - \frac{q'_{\text{liq}} - q'_{\text{vap}}}{B} \right) > 0, \\ B \stackrel{\text{def}}{=} c_{v_{\text{liq}}} \bar{\gamma}_{\text{liq}} - c_{v_{\text{vap}}} \bar{\gamma}_{\text{vap}}.$$

Cette fonction suggère plusieurs remarques :

- 2.1. Les hypothèses 2.3 à la page 35, c'est-à-dire le fait que, à saturation, les volumes $\tau_{\alpha}^{\text{sat}}(P)$, les énergies internes $\varepsilon_{\alpha}^{\text{sat}}(P)$ et les entropies molaires $s_{\alpha}^{\text{sat}}(P)$ (et donc les enthalpies $h_{\alpha}^{\text{sat}}(P)$ aussi) sont plus petits dans la phase liquide que

dans la phase vapeur, imposent certaines restrictions sur les coefficients. De plus, pour des raisons de vraisemblance physique, il faut que la vitesse du son du liquide soit supérieure à celle de la vapeur. S'il n'est pas possible de trouver de façon explicite des conditions suffisantes qui garantissent la satisfaction de toutes ces hypothèses (comme on a pu faire pour le cas de deux gaz parfaits), cependant on peut au moins établir des conditions nécessaires qui doivent être vérifiées par les coefficients $c_{v\alpha}$, $\bar{\gamma}_\alpha$, π_α . Notamment on observe que :

2.1.1. l'hypothèse $h_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) < h_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)$ est satisfaite si et seulement si

$$B = c_{v\text{liq}} \bar{\gamma}_{\text{liq}} - c_{v\text{vap}} \bar{\gamma}_{\text{vap}} < 0$$

(rappelons que, à saturation, $h_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) < h_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)$ si et seulement si $s_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) < s_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)$);

2.1.2. l'hypothèse $\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) < \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)$ est satisfaite si et seulement si

$$(c_{v\text{liq}} \Gamma_{\text{liq}} - c_{v\text{vap}} \Gamma_{\text{vap}})P + c_{v\text{liq}} \Gamma_{\text{liq}} \pi_{\text{vap}} - c_{v\text{vap}} \Gamma_{\text{vap}} \pi_{\text{liq}} < 0$$

ce qui peut limiter l'intervalle des pressions admissibles ;

2.1.3. la dérivée première de l'inverse de la courbe de coexistence s'écrit

$$\frac{dT^{\text{sat}}}{dP} = \frac{T^{\text{sat}}(P)}{(P + \pi_{\text{liq}})(P + \pi_{\text{vap}})} \frac{(c_{v\text{liq}} \Gamma_{\text{liq}} - c_{v\text{vap}} \Gamma_{\text{vap}})P + c_{v\text{liq}} \Gamma_{\text{liq}} \pi_{\text{vap}} - c_{v\text{vap}} \Gamma_{\text{vap}} \pi_{\text{liq}}}{B},$$

ayant imposé $s_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) < s_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)$ et $\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) < \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)$, pour la relation de Clapeyron elle est donc bien croissante ;

2.1.4. pour des raisons de vraisemblance physique, il faut aussi que la vitesse du son du liquide soit supérieure à celle de la vapeur ; donc, à la même température, ceci est vérifié si et seulement si

$$\frac{\Gamma_{\text{vap}}}{\Gamma_{\text{liq}}} < \frac{c_{v\text{liq}} \bar{\gamma}_{\text{liq}}}{c_{v\text{vap}} \bar{\gamma}_{\text{vap}}} \quad (< 1);$$

on remarque que ceci implique $\bar{\gamma}_{\text{liq}} > \bar{\gamma}_{\text{vap}}$;

2.1.5. si on suppose $\pi_{\text{vap}} = 0$ (hypothèse classique), alors l'hypothèse $\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) < \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)$ implique

$$c_{v\text{liq}} < c_{v\text{vap}} ;$$

(c'est une condition seulement nécessaire mais pas suffisante).

2.2. On remarque que, si $\pi_{\text{liq}} = \pi_{\text{vap}} = \Pi$, on peut inverser la fonction $P \mapsto T^{\text{sat}}$ et écrire

$$T \mapsto P^{\text{sat}} = T \exp \left(\frac{m_{\text{liq}} - m_{\text{vap}}}{c_{v\text{liq}} \bar{\gamma}_{\text{liq}} - c_{v\text{vap}} \bar{\gamma}_{\text{vap}}} - 1 \right) \left(\frac{(c_{v\text{liq}} \bar{\gamma}_{\text{liq}} \Gamma_{\text{liq}})^{c_{v\text{liq}}}}{(c_{v\text{vap}} \bar{\gamma}_{\text{vap}} \Gamma_{\text{vap}})^{c_{v\text{vap}}}} \right)^{\frac{1}{c_{v\text{liq}} \bar{\gamma}_{\text{liq}} - c_{v\text{vap}} \bar{\gamma}_{\text{vap}}}} - \Pi;$$

TAB. 6.1.: Paramètres d'un fluide virtuel et de sa vapeur pour une loi d'état de type *Stiffened Gas* simplifiée – exemple 1

Phase	c_v [J/(kg · K)]	$\bar{\gamma}$	π [Pa]	q [J/kg]	q' [J/(kg · K)]
Liquide	900	1.4	10^5	0	1000
Vapeur	1110	1.3	0	0	0

si, de plus, $\Pi = m_{\text{liq}} = m_{\text{vap}} = 0$ on retrouve la courbe de coexistence des gaz parfaits.

Exemple 1 Un fluide virtuel qui vérifie (dans un intervalle qu'on va établir) toutes les contraintes du point (2.1) est donné au tableau 6.1. En effet on remarque que

1. l'hypothèse $h_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) < h_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)$ est satisfaite car

$$B = c_{v\text{liq}} \bar{\gamma}_{\text{liq}} - c_{v\text{vap}} \bar{\gamma}_{\text{vap}} = -170 < 0;$$

2. puisque $(c_{v\text{liq}} \Gamma_{\text{liq}} - c_{v\text{vap}} \Gamma_{\text{vap}}) = 30$, l'hypothèse $\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) < \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)$ est satisfaite si et seulement si

$$P < -\frac{c_{v\text{liq}} \Gamma_{\text{liq}} \tau_{\text{vap}} - c_{v\text{vap}} \Gamma_{\text{vap}} \tau_{\text{liq}}}{(c_{v\text{liq}} \Gamma_{\text{liq}} - c_{v\text{vap}} \Gamma_{\text{vap}})} = -\frac{-3.3 \times 10^7}{30} = 1.1 \times 10^6 \text{ Pa};$$

3. les deux points précédents assurent que la fonction $T \mapsto P^{\text{sat}}$ est croissante pour $0 < P < 1.1 \times 10^6 \text{ Pa}$;
4. la vitesse du son du liquide est supérieure à celle de la vapeur car on a bien

$$\frac{\Gamma_{\text{vap}}}{\Gamma_{\text{liq}}} = 0.75 < \frac{c_{v\text{liq}} \bar{\gamma}_{\text{liq}}}{c_{v\text{vap}} \bar{\gamma}_{\text{vap}}} \approx 0.88111 \quad (< 1);$$

5. ayant supposé $\pi_{\text{vap}} = 0$ on a bien $c_{v\text{liq}} < c_{v\text{vap}}$ mais pour que $\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) < \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)$ il faut de plus que

$$P > 8 \times 10^4 \text{ Pa}.$$

En conclusion, ce fluide virtuel vérifie les hypothèse 2.3 à la page 35, la croissance de $T \mapsto P^{\text{sat}}$ ainsi que la condition de vraisemblance physique sur les vitesses du son des deux phases seulement pour

$$8 \times 10^4 \text{ Pa} < P < 1.1 \times 10^6 \text{ Pa}.$$

TAB. 6.2.: Paramètres d'un fluide virtuel et de sa vapeur pour une loi d'état de type *Stiffened Gas* simplifiée – exemple 2

Phase	c_v [J/(kg·K)]	$\bar{\gamma}$	π [Pa]	q [J/kg]	q' [J/(kg·K)]
Liquide	800	1.4	10^5	0	1000
Vapeur	1110	1.3	0	0	0

Exemple 2 Un autre fluide virtuel qui vérifie toutes les contraintes du point (2.1) sans restrictions cette fois-ci sur la pression maximale de validité est donné au tableau 6.2. Effectivement on a que

1. l'hypothèse $h_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) < h_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)$ est satisfaite car

$$B = c_{v\text{liq}} \bar{\gamma}_{\text{liq}} - c_{v\text{vap}} \bar{\gamma}_{\text{vap}} = -310 < 0;$$

2. puisque $(c_{v\text{liq}} \Gamma_{\text{liq}} - c_{v\text{vap}} \Gamma_{\text{vap}}) = -10$, l'hypothèse $\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) < \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)$ est satisfaite si et seulement si

$$P > -\frac{c_{v\text{liq}} \Gamma_{\text{liq}} \pi_{\text{vap}} - c_{v\text{vap}} \Gamma_{\text{vap}} \pi_{\text{liq}}}{(c_{v\text{liq}} \Gamma_{\text{liq}} - c_{v\text{vap}} \Gamma_{\text{vap}})} = -\frac{-3.3 \times 10^7}{-10} = -3.3 \times 10^6 \text{ Pa};$$

3. les deux points précédents assurent que la fonction $T \mapsto P^{\text{sat}}$ est croissante pour toute $P > 0 \text{ Pa}$;
4. la vitesse du son du liquide est supérieure à celle de la vapeur car on a bien

$$\frac{\Gamma_{\text{vap}}}{\Gamma_{\text{liq}}} = 0.75 < \frac{c_{v\text{liq}} \bar{\gamma}_{\text{liq}}}{c_{v\text{vap}} \bar{\gamma}_{\text{vap}}} \approx 0.78 \quad (< 1);$$

5. ayant supposé $\pi_{\text{vap}} = 0$ on a bien $c_{v\text{liq}} < c_{v\text{vap}}$ mais pour que $\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) < \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)$ il faut de plus que

$$P > 6.7 \times 10^4 \text{ Pa}.$$

En conclusion, ce fluide virtuel vérifie les hypothèse 2.3 à la page 35, la croissance de $T \mapsto P^{\text{sat}}$ ainsi que la condition de vraisemblance physique sur les vitesses du son des deux phases pour toute pression supérieure à $6.7 \times 10^4 \text{ Pa}$.

6.4. Cas général

Si q_α est non nul pour la phase liquide et/ou la phase vapeur, la démarche précédente se complique. On va voir qu'en effet, puisqu'il n'est plus possible d'obtenir une expression explicite de la courbe de coexistence, il n'est aussi plus possible de réduire le calcul de la loi de changement de phase à la recherche de la solution d'une seule équation sinon par un calcul approché.

6.4.1. Loi de changement de phase

La démarche est analogue à celle du cas simplifié : pour $(\tau, \varepsilon) \in \mathcal{C}$ donnés, il s'agit de trouver le quintuplé $(\tau_{\text{liq}}^*, \varepsilon_{\text{liq}}^*, \tau_{\text{vap}}^*, \varepsilon_{\text{vap}}^*, y^*)$ solution du système

$$\begin{cases} P_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = P_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) \end{cases} \quad (6.3a)$$

$$\begin{cases} T_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = T_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) \end{cases} \quad (6.3b)$$

$$\begin{cases} g_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = g_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) \end{cases} \quad (6.3c)$$

$$\begin{cases} \varepsilon = y \varepsilon_{\text{liq}} + (1 - y) \varepsilon_{\text{vap}} \end{cases} \quad (6.3d)$$

$$\begin{cases} \tau = y \tau_{\text{liq}} + (1 - y) \tau_{\text{vap}} \end{cases} \quad (6.3e)$$

avec y^* appartenant à l'intervalle ouverte $]0, 1[$.

On va d'abord montrer que ce système est équivalent à un système de deux équations en deux inconnues. La différence par rapport au cas simplifié est qu'il n'est plus possible de le ramener à une seule équation non-linéaire. On proposera alors une équation qui est une approximation de ce système.

On commence par observer que, à partir des relations (6.3a)-(6.3b), on peut écrire les volumes et les énergies internes en fonction d'une même pression P et d'une même température T :

$$\begin{aligned} \varepsilon_\alpha(T, P) &= c_{v_\alpha} T \frac{P + \pi_\alpha \bar{\gamma}_\alpha}{P + \pi_\alpha}, \\ \tau_\alpha(T, P) &= c_{v_\alpha} \Gamma_\alpha \frac{T}{P + \pi_\alpha}, \end{aligned}$$

α étant liq ou vap.

En utilisant l'équation (6.3e), on écrit la fraction volumique y en fonction de P et T

$$y(P, T) = \frac{\tau - \tau_{\text{vap}}(P, T)}{\tau_{\text{liq}}(P, T) - \tau_{\text{vap}}(P, T)}.$$

On remplace cette expression dans l'équation (6.3d) et donc le système (6.3) se réécrit comme un système de deux équations en les deux inconnues pression et température :

$$\begin{cases} g_{\text{liq}}(P, T) = g_{\text{vap}}(P, T), \end{cases} \quad (6.4a)$$

$$\begin{cases} \frac{\tau - \tau_{\text{vap}}(P, T)}{\tau_{\text{liq}}(P, T) - \tau_{\text{vap}}(P, T)} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{vap}}(P, T)}{\varepsilon_{\text{liq}}(P, T) - \varepsilon_{\text{vap}}(P, T)}. \end{cases} \quad (6.4b)$$

La thermodynamique garantit que le système (6.3) et le système (6.4) sont équivalents.

Loi approchée

Nous voulons maintenant simplifier ultérieurement les calculs en réduisant le système (6.4) à une seule équation. Pour cela observons que l'équation (6.4a) définie la courbe de coexistence $T \mapsto p^{\text{sat}}(T)$ (ou de l'inverse) et donc le système (6.4) est «en théorie» équivalent à une équation non-linéaire. Malheureusement, si $q_\alpha \neq 0$ pour au moins une des deux phases, il n'est pas possible d'obtenir une expression explicite de cette courbe ni de son inverse. Pour contourner ce problème on cherche alors une «bonne» approximation $T \mapsto \hat{p}^{\text{sat}}(T) \approx p^{\text{sat}}(T)$ qui permet d'exprimer de façon approchée les volumes et les énergies internes à saturation en fonction de la seule variable T et donc de reconduire le calcul de la loi de changement de phase à la résolution de l'équation non-linéaire suivante :

$$\frac{\tau - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}$$

où $\varepsilon_\alpha^{\text{sat}}(T)$ et $\tau_\alpha^{\text{sat}}(T)$ sont approchés naturellement comme suit :

$$\begin{aligned} \varepsilon_\alpha^{\text{sat}}(T) &\stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_\alpha(T, p^{\text{sat}}(T)) \approx \varepsilon_\alpha(T, \hat{p}^{\text{sat}}(T)) = c_{v,\alpha} T \frac{\hat{p}^{\text{sat}}(T) + \pi_\alpha \gamma_\alpha}{\hat{p}^{\text{sat}}(T) + \pi_\alpha} \\ \tau_\alpha^{\text{sat}}(T) &\stackrel{\text{def}}{=} \tau_\alpha(T, p^{\text{sat}}(T)) \approx \tau_\alpha(T, \hat{p}^{\text{sat}}(T)) = c_{v,\alpha} \Gamma_\alpha \frac{T}{\hat{p}^{\text{sat}}(T) + \pi_\alpha}. \end{aligned}$$

Par conséquent cette équation est une approximation du système (6.4). La précision de cette stratégie repose entièrement sur le choix de la fonction $T \mapsto \hat{p}^{\text{sat}}(T) \approx p^{\text{sat}}(T)$. Pour plus de détail sur ce choix on renvoie aux paragraphes 6.7 à la page 176 et 6.8 à la page 185 qui montrent sur deux exemples une méthode pour choisir cette fonction.

★ **REMARQUE 6.2.** Dans cette formulation on a fait une approximation des quatres fonctions prises en fonction de la température. Cependant il pourrait être plus simple dans certains cas de les considérer comme fonctions de la pression. Dans ce cas alors l'équation se réécrit tout simplement

$$\frac{\tau - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)}{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)} \quad (6.5)$$

avec $\tau_\alpha^{\text{sat}}(P) = \tau_\alpha(P, T^{\text{sat}}(P))$ et $\varepsilon_\alpha^{\text{sat}}(P) = \varepsilon_{\text{liq}}(P, T^{\text{sat}}(P))$.

Dans la suite on développera l'étude seulement pour le premier cas, sachant que l'adaptation à ce deuxième cas est immédiate. ❀

Donc, en combinant le tout avec (6.2d), on trouve que la résolution du système (6.2) est réduite à la recherche (en générale numérique) de la solution de l'équation de changement de phase (voir définition 2.10 à la page 55) suivante

Équation de changement de phase approchée

$$\frac{\tau - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}$$

où $\varepsilon_{\alpha}^{\text{sat}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_{\alpha}(T, P^{\text{sat}}(T))$ et $\tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \tau_{\alpha}(T, P^{\text{sat}}(T))$ sont approchés comme suit :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\alpha}^{\text{sat}}(T) &\approx \varepsilon_{\alpha}(T, \hat{P}^{\text{sat}}(T)) = c_{v,\alpha} T \frac{\hat{P}^{\text{sat}}(T) + \pi_{\alpha} \gamma_{\alpha}}{\hat{P}^{\text{sat}}(T) + \pi_{\alpha}} \\ \tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T) &\approx \tau_{\alpha}(T, \hat{P}^{\text{sat}}(T)) = c_{v,\alpha} \Gamma_{\alpha} \frac{T}{\hat{P}^{\text{sat}}(T) + \pi_{\alpha}}. \end{aligned}$$

6.5. Vitesse du son

On a vu au théorème 3.2 à la page 84 que la vitesse du son c_m du mélange à l'équilibre, ainsi que celle des phases pures bien évidemment, est toujours réelle et positive mais on a aussi vu à la proposition 3.3 à la page 100 que la vitesse du son de mélange est toujours plus petite que celle des phases pures.

Dans notre modélisation, où ce mélange est purement fictif, une telle chute de la vitesse du son peut avoir d'importantes conséquences : si l'interface est trop diffusée, la propagation des ondes acoustiques sera plus lente lorsqu'elles traversent l'interface, ce qui pourrait perturber en partie la dynamique de l'écoulement.

Bien que dans notre modélisation ce mélange soit purement fictif (il est en effet un artifice qui sert à contourner le problème de la diffusion numérique en gérant en même temps le changement de phase), cette loi d'état est toutefois aussi utilisée pour des vrais mélanges physiques. Dans ces cas ce comportement est exactement celui que l'on attend.

Quoi qu'il en soit, dans les deux cas il est important de donner une estimation de la vitesse du son pour cette loi d'état de changement de phase. Pour cela on réécrit la vitesse du son de chaque phase pure ainsi que celle du mélange à l'équilibre en fonction de la température (tout changement de phase a lieu à température fixée) et d'une autre variable comme, par exemple, le volume molaire τ ou la fraction volumique y . On a vu au chapitre 3 que pour calculer la vitesse du son pour les états de mélange à l'équilibre on utilise la courbe de saturation.

Par définition le carré de la vitesse du son s'écrit

$$(\tau, s) \mapsto c^2 \stackrel{\text{def}}{=} -\tau^2 \left. \frac{\partial P^{\text{eq}}}{\partial \tau} \right|_s.$$

Sachant que les dérivées adiabatiques peuvent être réécrites comme des dérivées isothermes selon la relation (3.12), en prenant $\star = P^{\text{eq}}(\tau, s)$ et en observant que $\left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_T =$

$\left. \frac{\partial P}{\partial T} \right|_{\tau}$ (c'est une des relations de Maxwell, cf. le tableau 2.1 à la page 73), on obtient

$$c^2 = -\tau^2 \left[\left. \frac{\partial P}{\partial \tau} \right|_T - \left(\left. \frac{\partial P}{\partial T} \right|_{\tau} \right)^2 \left(\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{\tau} \right)^{-1} \right].$$

Puisque, à saturation, la pression est fonction de la seule température, nous allons calculer la vitesse du son pour les états monophasiques séparément du calcul de la vitesse du son pour les états de mélange à l'équilibre.

☛ **États «purs»** : si (τ, T) correspond à un état monophasique, sachant que

$$(\tau, T) \mapsto P = P_{\alpha} = c_{v\alpha} \Gamma_{\alpha} \frac{T}{\tau} - \pi_{\alpha}, \quad s = s_{\alpha} \quad \text{et} \quad \left. \frac{\partial s_{\alpha}}{\partial T} \right|_{\tau} = \frac{c_{v\alpha}}{T}$$

α étant liq ou vap, on obtient

$$\left. \frac{\partial P}{\partial \tau} \right|_T = -c_{v\alpha} \Gamma_{\alpha} \frac{T}{\tau^2} \quad \text{et} \quad \left. \frac{\partial P}{\partial T} \right|_{\tau} = \frac{c_{v\alpha} \Gamma_{\alpha}}{\tau},$$

d'où

$$c^2 = c_{\alpha}^2 = c_{v\alpha} \bar{\gamma}_{\alpha} \Gamma_{\alpha} T = \bar{\gamma}_{\alpha} \tau (P + \pi_{\alpha}).$$

☛ **États «de mélange à l'équilibre»** : si (τ, T) correspond à un état de mélange à l'équilibre, sachant que la pression ne dépend que de la température selon la relation

$$(\tau, T) \mapsto P = P^{\text{sat}}(T),$$

le calcul de la vitesse du son se simplifie car $\left. \frac{\partial P}{\partial \tau} \right|_T = 0$ et $\left. \frac{\partial P}{\partial T} \right|_{\tau} = \frac{dP^{\text{sat}}}{dT}$, ce qui donne

$$c^2 = \tau^2 \frac{\left(\frac{dP^{\text{sat}}}{dT} \right)^2}{\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{\tau}}.$$

Calculons donc les termes $\frac{dP^{\text{sat}}}{dT}$ et $\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{\tau}$.

☛ **Calcul de $\frac{dP^{\text{sat}}}{dT}$** : si on a une expression explicite de $T \mapsto P^{\text{sat}}(T)$, on peut calculer analytiquement cette dérivée. Si, en revanche, elle reste implicite, pour calculer $\frac{dP^{\text{sat}}}{dT}$ il est opportun d'utiliser la relation de Clausius-Clapeyron (3.19) où les $s_{\alpha}^{\text{sat}}(T)$ et $\tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T)$ sont données par

$$s_{\alpha}^{\text{sat}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} s_{\alpha}(T, P^{\text{sat}}(T)) = c_{v\alpha} \bar{\gamma}_{\alpha} \ln T - c_{v\alpha} \Gamma_{\alpha} \ln(P^{\text{sat}}(T) + \pi_{\alpha}) + \quad (6.6)$$

$$+ m_{\alpha} + c_{v\alpha} \bar{\gamma}_{\alpha} \ln c_{v\alpha} + c_{v\alpha} \Gamma_{\alpha} \ln \Gamma_{\alpha},$$

$$\tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \tau_{\alpha}(T, P^{\text{sat}}(T)) = c_{v\alpha} \Gamma_{\alpha} \frac{T}{P^{\text{sat}}(T) + \pi_{\alpha}}. \quad (6.7)$$

☛ **Calcul de $\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{\tau}$** : on rappelle d'abord que

$$s(\tau, T) = y(\tau, T) s_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) + (1 - y(\tau, T)) s_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)$$

avec

$$y(\tau, T) = \frac{\tau - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}.$$

Donc

$$\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{\tau} = \left. \frac{\partial y}{\partial T} \right|_{\tau} (s_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - s_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)) + y(\tau, T) \frac{ds_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{dT} + (1 - y(\tau, T)) \frac{ds_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}{dT}$$

avec $\left. \frac{\partial y}{\partial T} \right|_{\tau}$ calculé à la (3.17). Pour calculer $\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_{\tau}$ (et donc la vitesse du son de mélange) il suffit alors de donner les expressions des dérivées premières de $\tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T)$ et $s_{\alpha}^{\text{sat}}(T)$. Des relations (6.6) et (6.7) on déduit immédiatement

$$\begin{aligned} \frac{d\tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T)}{dT} &= \frac{c_{v\alpha} \Gamma_{\alpha}}{p^{\text{sat}}(T) + \pi_{\alpha}} - \frac{c_{v\alpha} \Gamma_{\alpha} T}{(p^{\text{sat}}(T) + \pi_{\alpha})^2} \frac{dp^{\text{sat}}}{dT}, \\ \frac{ds_{\alpha}^{\text{sat}}(T)}{dT} &= \frac{c_{v\alpha} \bar{\gamma}_{\alpha}}{T} - \frac{c_{v\alpha} \Gamma_{\alpha}}{p^{\text{sat}}(T) + \pi_{\alpha}} \frac{dp^{\text{sat}}}{dT}. \end{aligned}$$

avec $\frac{dp^{\text{sat}}}{dT}$ calculée à la relation (3.19).

6.6. Dérivée fondamentale

On a vu au chapitre 3 qu'il n'est pas simple de donner un signe à la dérivée fondamentale pour les états de mélange à l'équilibre. Cependant, le signe de cette quantité étant fondamental pour la résolution théorique et numérique du problème de Riemann, on a supposé que cette quantité est positive dans tout le mélange à l'équilibre (cf. hypothèse 3.2 à la page 90). Ensuite on a pu vérifier analytiquement que cette hypothèse est satisfaite lorsque les deux phases sont décrites par deux lois d'état de type gaz parfait polytropique. On verra en revanche que pour les *stiffened gas* il n'est plus possible de signer cette quantité analytiquement mais, en en donnant une expression en fonction de la température et du volume molaire, on pourra vérifier au moins numériquement cette hypothèse sur des exemples tels l'eau et le dodécane. Cette fois-ci encore le calcul est basé sur la courbe de coexistence (exacte ou approchée).

On a vu au chapitre 3 que la dérivée fondamentale peut s'écrire sous la forme

$$\mathfrak{G} = \frac{\tau^3}{2c^2} \left. \frac{\partial^2 p}{\partial \tau^2} \right|_s.$$

Puisqu'on connaît la vitesse du son partout dans le fluide, il ne reste à calculer que la dérivée seconde

$$\left. \frac{\partial^2 p}{\partial \tau^2} \right|_s.$$

Comme pour la vitesse du son, nous considérerons les états monophasiques séparément des états de mélange à l'équilibre.

☛ États «purs» : si (τ, T) correspond à un état monophasique, sachant que

$$\left. \frac{\partial P^{\text{eq}}}{\partial \tau} \right|_s = -\frac{c_\alpha^2}{\tau^2} = -\frac{\bar{\gamma}_\alpha(P_\alpha + \pi_\alpha)}{\tau},$$

on calcule facilement la dérivée seconde

$$\left. \frac{\partial^2 P^{\text{eq}}}{\partial \tau^2} \right|_s = -\frac{\bar{\gamma}_\alpha}{\tau} \left. \frac{\partial P_\alpha}{\partial \tau} \right|_s + \frac{\bar{\gamma}_\alpha(P_\alpha + \pi_\alpha)}{\tau^2} = (\bar{\gamma}_\alpha + 1)\bar{\gamma}_\alpha \frac{(P_\alpha + \pi_\alpha)}{\tau^2} = \frac{c_\alpha^2(\bar{\gamma}_\alpha + 1)}{\tau^3}$$

et on obtient

$$\mathfrak{G} = \mathfrak{G}_\alpha = \frac{\bar{\gamma}_\alpha + 1}{2}.$$

☛ États «de mélange à l'équilibre» : si (τ, T) correspond à un état de mélange à l'équilibre, la pression ne dépend que de la température selon la relation

$$(\tau, T) \mapsto P = P^{\text{sat}}(T).$$

Au chapitre 3 on a vu alors que la dérivée fondamentale se réécrit, en fonction des dérivées isothermes, sous la forme

$$\mathfrak{G} = \frac{\tau}{2} \left(\left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_s \right)^{-1} \frac{dP^{\text{sat}}}{dT} \left(3 \frac{d^2 P^{\text{sat}}}{dT^2} - \frac{dP^{\text{sat}}}{dT} \left(\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_\tau \right)^{-1} \left. \frac{\partial^2 s}{\partial T^2} \right|_\tau \right).$$

Les termes $\left. \frac{\partial s}{\partial \tau} \right|_T$, $\left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_\tau$ et $\frac{dP^{\text{sat}}}{dT}$ ont déjà été écrits en fonction de τ et de T lors du calcul de la vitesse du son ; il suffit donc de calculer les dérivées secondes $\left. \frac{\partial^2 s}{\partial T^2} \right|_\tau$ et $\frac{d^2 P^{\text{sat}}}{dT^2}$:

• *calcul de $\frac{d^2 P^{\text{sat}}}{dT^2}$* : à partir de la relation de Clausius-Clapeyron (3.19) on a prouvé (voir équation (3.21)) que

$$\frac{d^2 P^{\text{sat}}}{dT^2} = \frac{\frac{ds_{\text{vap}}^{\text{sat}}}{dT} - \frac{ds_{\text{liq}}^{\text{sat}}}{dT}}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)} - \frac{s_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T) - s_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)} \frac{\frac{d\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}}{dT} - \frac{d\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}}{dT}}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)} \quad (6.8)$$

et les expressions de $s_\alpha^{\text{sat}}(T)$, $\tau_\alpha^{\text{sat}}(T)$, $\frac{ds_\alpha^{\text{sat}}(T)}{dT}$ et $\frac{d\tau_\alpha^{\text{sat}}(T)}{dT}$ ont été déjà données lors du calcul de la vitesse du son ;

• *calcul de $\left. \frac{\partial^2 s}{\partial T^2} \right|_\tau$* : on rappelle que

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 s}{\partial T^2} \right|_\tau &= \left. \frac{\partial^2 y}{\partial T^2} \right|_\tau (s_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - s_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)) + \\ &\quad + 2 \left. \frac{\partial y}{\partial T} \right|_\tau \left(\frac{ds_{\text{liq}}^{\text{sat}}}{dT} - \frac{ds_{\text{vap}}^{\text{sat}}}{dT} \right) + \\ &\quad + y \frac{d^2 s_{\text{liq}}^{\text{sat}}}{dT^2} + (1 - y) \frac{d^2 s_{\text{vap}}^{\text{sat}}}{dT^2}, \end{aligned}$$

les expressions de $\left. \frac{\partial y}{\partial T} \right|_\tau$, $\frac{ds_\alpha^{\text{sat}}(T)}{dT}$ ayant été données lors du calcul de la vitesse

TAB. 6.3.: Paramètres de l'eau et de sa vapeur pour une loi d'état de type *Stiffened Gas*

Phase	c_v [J/(kg · K)]	$\bar{\gamma}$	π [Pa]	q [J/kg]	m [J/(kg · K)]
Liquide	1816.2	2.35	10^9	-1167.056×10^3	-32765.55596
Vapeur	1040.14	1.43	0	2030.255×10^3	-33265.65947

du son. Puisque (voir équation (3.22))

$$\frac{\partial^2 y}{\partial T^2} \Big|_{\tau} = - \frac{y \frac{d^2 \tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}}{dT^2} + (1-y) \frac{d^2 \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}}{dT^2} + 2 \frac{\partial y}{\partial T} \Big|_{\tau} \left(\frac{d\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}}{dT} - \frac{d\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}}{dT} \right)}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)},$$

il ne reste à calculer que les dérivées secondes de $\tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T)$ et $s_{\alpha}^{\text{sat}}(T)$:

$$\frac{d^2 \tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T)}{dT^2} = - \frac{c_{v\alpha} \Gamma_{\alpha}}{p^{\text{sat}}(T) + \pi_{\alpha}} \left\{ \left(\frac{1}{p^{\text{sat}}(T) + \pi_{\alpha}} + 1 - \frac{dp^{\text{sat}}}{dT} \right) \frac{dp^{\text{sat}}}{dT} + T \frac{d^2 p^{\text{sat}}}{dT^2} \right\},$$

$$\frac{d^2 s_{\alpha}^{\text{sat}}(T)}{dT^2} = - \frac{c_{v\alpha} \bar{\gamma}_{\alpha}}{T^2} + \frac{c_{v\alpha} \Gamma_{\alpha}}{(p^{\text{sat}}(T) + \pi_{\alpha})^2} \left(\frac{dp^{\text{sat}}}{dT} \right)^2 - \frac{c_{v\alpha} \Gamma_{\alpha}}{p^{\text{sat}}(T) + \pi_{\alpha}} \frac{d^2 p^{\text{sat}}}{dT^2},$$

avec $\frac{dp^{\text{sat}}}{dT}$ et $\frac{d^2 p^{\text{sat}}}{dT^2}$ calculées précédemment.

6.7. Premier exemple : eau liquide et vapeur d'eau

Pour décrire le comportement de l'eau et de sa vapeur avec deux lois de type *stiffened gaz*, Le Metayer [65], Le Metayer *et al.* [66] ont suggéré des valeurs pour les constantes c_v , $\bar{\gamma}$, π , q et m qui donnent des estimations acceptables du comportement de l'eau et sa vapeur dans un large intervalle de températures. Les valeurs de ces constantes sont données à la table 6.3 ; une explication de la méthode de calcul des paramètres ainsi qu'une comparaison avec les tables de l'eau est présentée en l'annexe 6.A à la page 186.

6.7.1. Courbe de coexistence

Comme on a vu au paragraphe 6.4.1 à la page 170, tout ce dont on a besoin pour calculer la loi d'état de changement de phase $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$ est la fonction $T \mapsto \hat{p}^{\text{sat}}$. Pour obtenir une «bonne» fonction nous avons choisi d'utiliser des approximations au sens des moindres carrés sur l'ensemble de points ainsi construit :

- ☛ considérons d'abord une discrétisation de la température $\{T^i = 278 + 3i\}_{i=0}^{99}$ mesurée en K ;
- ☛ calculons ensuite les valeurs de la pression de saturation (en Pa) en ces points $\{p^{\text{sat}}(T_i)\}_{i=0}^{99}$ en résolvant numériquement l'équation $g_{\text{liq}}(P, T^i) = g_{\text{vap}}(P, T^i)$ pour $i = 0, \dots, 99$; pour cela nous avons utilisé un logiciel de calcul formel qui permet une résolution à une précision arbitraire (Maple à 10^{-40} près en l'occurrence) ;

on définit enfin l'ensemble de points

$$\mathfrak{A} \stackrel{\text{def}}{=} \{(T^i, p^{\text{sat}}(T^i))\}_{i=0}^{99}.$$

En observant dans le plan (T, P) l'ensemble \mathfrak{A} il est naturel de chercher la fonction $T \mapsto \hat{p}^{\text{sat}}$ sous la forme de l'exponentielle d'une série de Laurent :

$$T \mapsto \hat{p}^{\text{sat}} = \exp \left(\sum_{k=-m}^{k=n} a_k T^k \right), \quad m, n \geq 0.$$

En faisant varier les coefficients m, n et en donnant différents poids aux points de l'ensemble \mathfrak{A} afin d'avoir une erreur relative minimale et globalement «homogène» dans tout l'intervalle de températures $[278, 572]$, on obtient des bonnes approximations avec $m = n = 8$ et les coefficients suivants :¹

$$\begin{array}{lll} a_{-8} = 1.32980 \times 10^{19} & a_{-7} = -2.67005 \times 10^{17} & a_{-6} = 2.02074 \times 10^{15} \\ a_{-5} = -6.10352 \times 10^{12} & a_{-4} = -5.27360 \times 10^9 & a_{-3} = 1.44290 \times 10^8 \\ a_{-2} = -1.21327 \times 10^6 & a_{-1} = 1.08248 \times 10^3 & \\ a_0 = 6.14901 & a_1 = 3.55861 \times 10^{-2} & a_2 = 1.49897 \times 10^{-6} \\ a_3 = -1.79512 \times 10^{-6} & a_4 = 3.34571 \times 10^{-10} & a_5 = -1.48927 \times 10^{-13} \\ a_6 = -2.34782 \times 10^{-16} & a_7 = 3.18009 \times 10^{-19} & a_8 = -1.15479 \times 10^{-22} \end{array}$$

Pour vérifier la qualité de cette approximation on compare la pression de saturation $p^{\text{sat}}(T^i)$ (exacte à 10^{-40} près) avec la pression de saturation approchée $\hat{p}^{\text{sat}}(T^i)$ ci-dessus. On peut remarquer à la figure 6.1a à la page suivante l'excellent comportement de la fonction approchée par rapport aux points de l'ensemble \mathfrak{A} . Pour quantifier cette précision on a calculé les maxima de l'erreur absolue (cf. figure 6.1b à la page suivante) et de l'erreur relative (cf. figure 6.1c) discrètes et on a obtenu les estimations suivantes :

$$\max_{0 \leq i \leq 99} |p^{\text{sat}}(T^i) - \hat{p}^{\text{sat}}(T^i)| < 0.02 \text{ Pa}, \quad \max_{0 \leq i \leq 99} \frac{|p^{\text{sat}}(T^i) - \hat{p}^{\text{sat}}(T^i)|}{p^{\text{sat}}(T^i)} < 2.7 \times 10^{-9}.$$

6.7.2. Loi de changement de phase

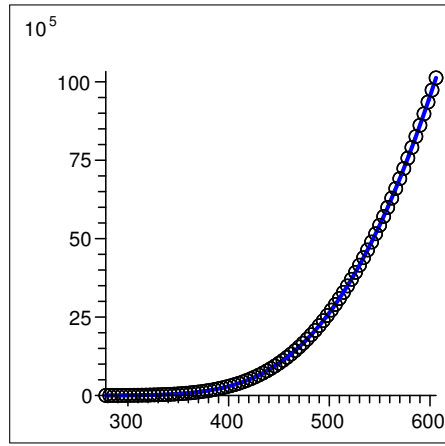
Une fois choisie la fonction $T \mapsto \hat{p}^{\text{sat}}$, le calcul de la loi de changement de phase est immédiat : pour tout (τ, ε) donné, on cherche (numériquement) l'unique solution de l'équation

$$\frac{\tau - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}$$

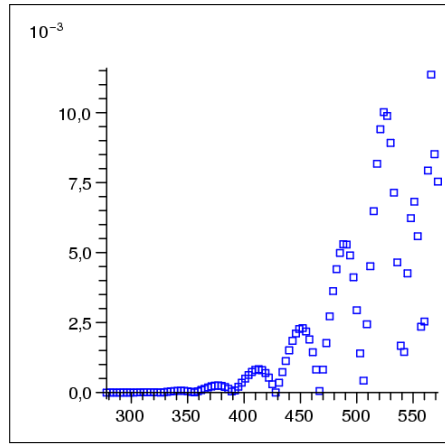
où $\tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T)$ et $\varepsilon_{\alpha}^{\text{sat}}(T)$ sont approchées par

$$\tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T) \approx \tau_{\alpha}(T, \hat{p}^{\text{sat}}(T)) = c_{v\alpha} \Gamma_{\alpha} \frac{T}{\hat{p}^{\text{sat}}(T) + \pi_{\alpha}},$$

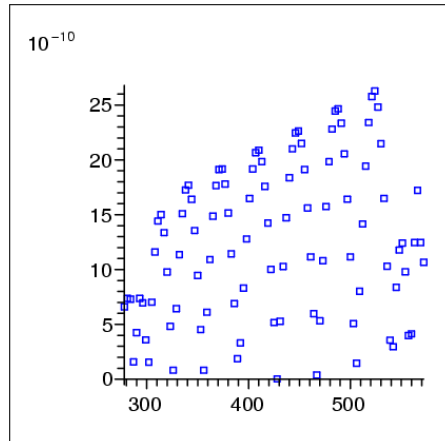
¹Le choix de la fonction «optimale» est un problème encore ouvert. Nous présentons ici juste une méthode empirique pour obtenir une précision acceptable pour nos simulations.



(a) Courbes de coexistence exacte $(T_i, p^{\text{sat}}(T_i))$ (circles) et approchée $T \mapsto \hat{p}^{\text{sat}}$ (ligne)



(b) Erreur absolue $|p^{\text{sat}}(T_i) - \hat{p}^{\text{sat}}(T_i)|$



(c) Erreur relative $\frac{|p^{\text{sat}}(T_i) - \hat{p}^{\text{sat}}(T_i)|}{p^{\text{sat}}(T_i)}$

FIG. 6.1.: Courbes de coexistence exacte $T \mapsto p^{\text{sat}}$ et approchée $T \mapsto \hat{p}^{\text{sat}}$ et estimation des erreurs

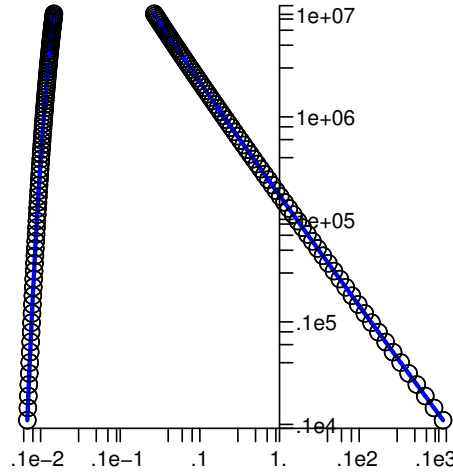


FIG. 6.2.: Dôme de saturation en échelle logarithmique : $\tau_\alpha \mapsto p^{\text{sat}}$ (circles), $\tau_\alpha \mapsto \hat{p}^{\text{sat}}$ (lignes)

$$\varepsilon_\alpha^{\text{sat}}(T) \approx \varepsilon_\alpha(T, \hat{p}^{\text{sat}}(T)) = c_{v_\alpha} T \frac{\hat{p}^{\text{sat}}(T) + \pi_\alpha \bar{\gamma}_\alpha}{\hat{p}^{\text{sat}}(T) + \pi_\alpha}.$$

Pour estimer la qualité d'une telle résolution on a représenté sur la figure 6.2 les courbes de saturation $\tau_\alpha \mapsto p^{\text{sat}}$ exactes et approchées et on voit un accord parfait.

Pour montrer la précision de cette stratégie nous allons maintenant comparer la solution T de l'équation de changement de phase

$$\frac{\tau - \tau_{\text{vap}}(T, p^{\text{sat}}(T))}{\tau_{\text{liq}}(T, p^{\text{sat}}(T)) - \tau_{\text{vap}}(T, p^{\text{sat}}(T))} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{vap}}(T, p^{\text{sat}}(T))}{\varepsilon_{\text{liq}}(T, p^{\text{sat}}(T)) - \varepsilon_{\text{vap}}(T, p^{\text{sat}}(T))} \quad (6.9)$$

(qui équivaut au système (6.3)) avec la solution de l'équation de changement de phase approchée

$$\frac{\tau - \tau_{\text{vap}}(T, \hat{p}^{\text{sat}}(T))}{\tau_{\text{liq}}(T, \hat{p}^{\text{sat}}(T)) - \tau_{\text{vap}}(T, \hat{p}^{\text{sat}}(T))} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{vap}}(T, \hat{p}^{\text{sat}}(T))}{\varepsilon_{\text{liq}}(T, \hat{p}^{\text{sat}}(T)) - \varepsilon_{\text{vap}}(T, \hat{p}^{\text{sat}}(T))} \quad (6.10)$$

(qui est une approximation du système (6.3)), pour différentes valeurs de τ et de ε , avec (τ, ε) état de mélange à l'équilibre. Pour cela il faut d'abord construire une suite d'états $\{(\tau, \varepsilon)^{i,j}\}_{i,j}$ qui appartient à la zone de mélange :

1. soit $(T^i = 278 + 3i)_{i=0}^{99}$ une suite de températures et $(y^j = j/15)_{j=0}^{15}$ une suite de fractions volumiques ;

2. soit $(\tilde{\tau}_\alpha, \tilde{\varepsilon}_\alpha)^{i,j}$ la solution exacte² du système

$$\begin{cases} P_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}})^{i,j} = P_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}})^{i,j} \\ T_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}})^{i,j} = T_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}})^{i,j} \\ g_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}})^{i,j} = g_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}})^{i,j} \end{cases}$$

avec $(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha)^{i,j}$ qui vérifient la loi d'état *stiffened gas*, c'est à dire

$$(P, T) \mapsto \varepsilon_\alpha = c_{v,\alpha} T \frac{P + \pi_\alpha \bar{\gamma}_\alpha}{P + \pi_\alpha} + q_\alpha, \quad (P, T) \mapsto \tau_\alpha = c_{v,\alpha} (\bar{\gamma}_\alpha - 1) \frac{T}{P + \pi_\alpha};$$

3. on pose $(\tau, \varepsilon)^{i,j} \stackrel{\text{def}}{=} y^j (\tilde{\tau}_{\text{liq}}, \tilde{\varepsilon}_{\text{liq}})^{i,j} + (1 - y^j) (\tilde{\tau}_{\text{vap}}, \tilde{\varepsilon}_{\text{vap}})^{i,j}$.

Soit enfin $(\hat{T}^{i,j}, \hat{y}^{i,j})$ la solution, obtenue encore avec le logiciel Maple, de l'équation (6.10) associée au couple $(\tau, \varepsilon)^{i,j}$. On obtient

$$\begin{aligned} \max_{\substack{0 \leq i \leq 99 \\ 0 \leq j \leq 15}} |T^i - \hat{T}^{i,j}| &< 2.0 \times 10^{-7} \text{ K}, & \max_{\substack{0 \leq i \leq 99 \\ 0 \leq j \leq 15}} \frac{|T^i - \hat{T}^{i,j}|}{T^i} &< 3.8 \times 10^{-10}, \\ \max_{\substack{0 \leq i \leq 99 \\ 0 \leq j \leq 15}} |y^j - \hat{y}^{i,j}| &< 3.0 \times 10^{-10}. \end{aligned}$$

Puisque les erreurs dues aux méthodes itératives utilisées pour résoudre les deux équations sont inférieures à 10^{-40} , les majorations ci-dessus correspondent seulement aux erreurs commises en utilisant $\hat{P}^{\text{sat}}(T)$ au lieu de $P^{\text{sat}}(T)$ et on remarque que la stratégie qui consiste à approcher la solution du système de changement de phase (6.3) (ou équiv. de l'équation (6.9)) avec la solution de l'équation (6.10) donne de très bons résultats, au moins pour le cas de l'eau et de sa vapeur.

★ **REMARQUE 6.3.** Dans Faccanoni *et al.* [35] nous avons donné une expression plus simple de la fonction $T \mapsto \hat{P}^{\text{sat}}$. Cette fonction simplifiée donne des bons résultats mais elle est toutefois moins précise pour des hautes températures. À titre comparatif voilà la fonction et les estimations des erreurs :

$$T \mapsto \hat{P}^{\text{sat}} = \exp \left(\sum_{k=0}^8 a_k T^k \right) \quad (6.11)$$

avec

$$\begin{array}{lll} a_0 = -110.562041 & a_1 = 1.411518 & a_2 = -0.808758 \times 10^{-2} \\ a_3 = 0.290760 \times 10^{-4} & a_4 = -0.687431 \times 10^{-7} & a_5 = 0.107095 \times 10^{-9} \\ a_6 = -0.106089 \times 10^{-12} & a_7 = 0.606689 \times 10^{-16} & a_8 = -0.152683 \times 10^{-19} \end{array}$$

² Bien évidemment nous n'avons pas une expression analytique de $P^{\text{sat}}(T)$ donc, pour tout T^i , on appelle «pression à saturation exacte» $P^{\text{sat}}(T^i)$ la solution numérique de $g_{\text{liq}}(P, T^i) = g_{\text{vap}}(P, T^i)$ obtenue avec une précision de 10^{-40} (pour cela nous avons utilisée la fonction `fsolve` du logiciel Maple).

et les majorations suivantes

$$\begin{aligned}
 \max_{0 \leq i \leq 83} |p^{\text{sat}}(T^i) - \hat{p}^{\text{sat}}(T^i)| &< 67.2 \text{ Pa}, & \max_{0 \leq i \leq 83} \frac{|p^{\text{sat}}(T^i) - \hat{p}^{\text{sat}}(T^i)|}{p^{\text{sat}}(T^i)} &< 1.8 \times 10^{-5}, \\
 \max_{\substack{0 \leq i \leq 83 \\ 0 \leq j \leq 15}} |T^i - \hat{T}^{i,j}| &< 1.2 \times 10^{-3} \text{ K}, & \max_{\substack{0 \leq i \leq 83 \\ 0 \leq j \leq 15}} \frac{|T^i - \hat{T}^{i,j}|}{T^i} &< 2.4 \times 10^{-6}, \\
 \max_{\substack{0 \leq i \leq 83 \\ 0 \leq j \leq 15}} |y^j - \hat{y}^{i,j}| &< 1.9 \times 10^{-6}.
 \end{aligned}$$



6.7.3. Vitesse du son et dérivée fondamentale

En utilisant les relations établies pour la fonction $T \mapsto \hat{p}^{\text{sat}}(T)$, on peut tracer la vitesse du son et la dérivée fondamentale en fonction de τ ou de y le long de différentes isothermes.

On présente sur les figures 6.3-6.4 l'évolution de la vitesse du son de mélange pour un mélange d'eau et de sa vapeur. Comme démontré au théorème 3.2 à la page 84 on voit que la vitesse du son du mélange c_m , ainsi que celle des phases pures bien évidemment, est strictement positive, mais on peut constater que la vitesse du son de mélange est toujours inférieure à la plus faible des vitesses du son. Si un tel comportement a été maintes fois vérifié expérimentalement pour des vrais mélanges, en revanche, si on considère ce mélange comme un artifice numérique (comme dans le cas de la simulation numérique directe qui nous concerne), une telle chute de la vitesse du son a d'importantes conséquences à la fois pour l'analyse physique et pour tous les aspects numériques. Puisque la propagation des ondes acoustiques est plus lente dans le mélange qu'au sein de chaque phase pure, cela signifie que les ondes acoustiques peuvent être mal calculées si la diffusion de l'interface est trop importante.

En revanche, d'un point de vue numérique cette chute ne pose aucun problème, au contraire : puisque souvent les algorithmes sont liés à un critère de stabilité temporel qui calcule un pas de temps critique basé sur les vitesses du son du modèle (condition CFL), avec ce modèle le pas de temps sera calculé avec la plus grande vitesse du son (ici l'eau à l'état liquide). Malheureusement ceci reste une grosse contrainte pour les calculs de grandes dimensions car cette limitation est présente même si la phase liquide est minoritaire.

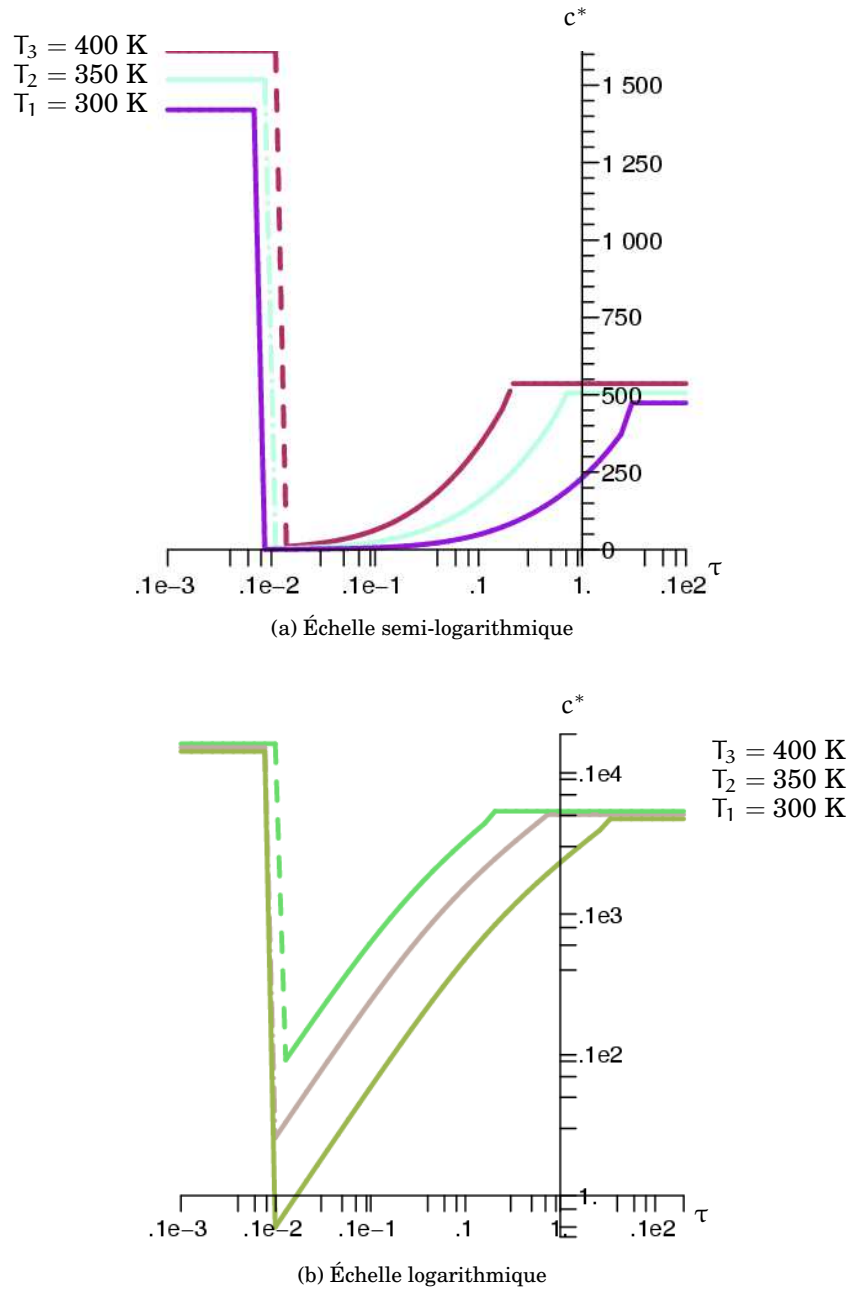
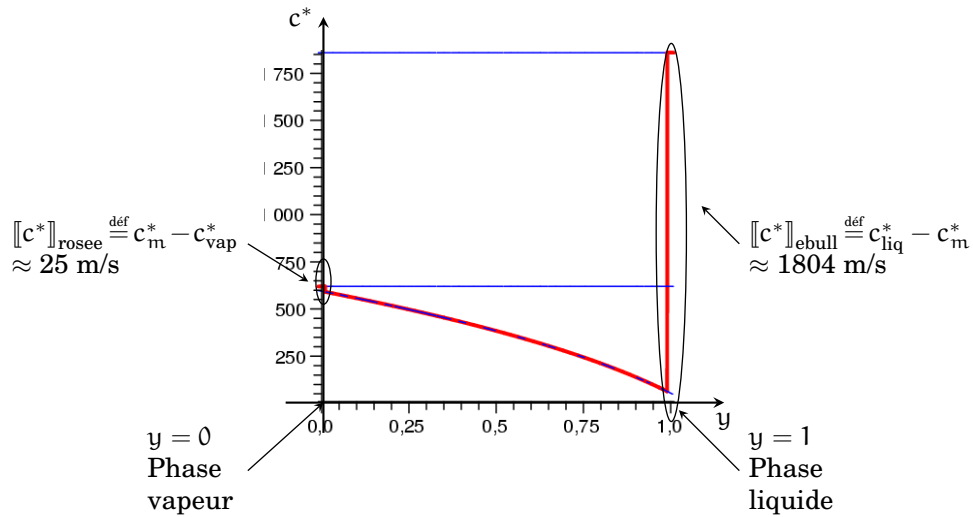
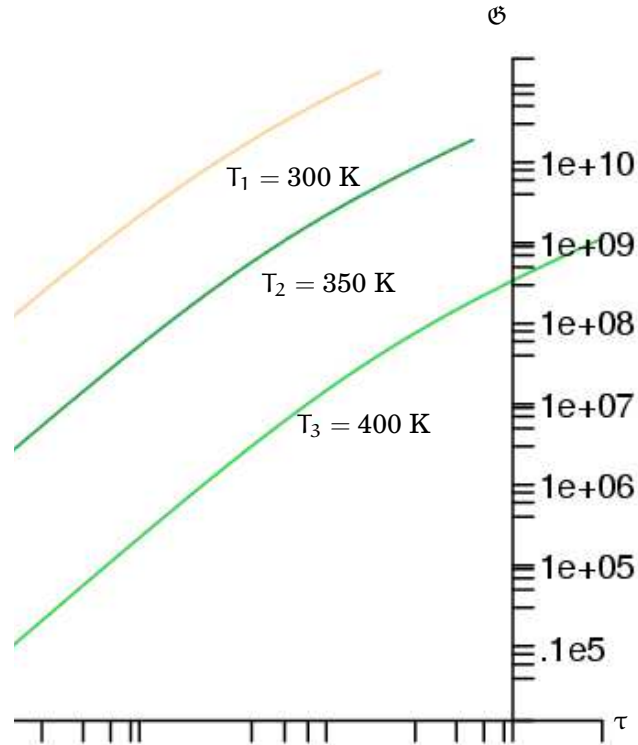


FIG. 6.3.: Vitesse du son $(\tau, T) \mapsto c^*|_T$ le long des trois isothermes correspondantes aux trois températures $T_i = (300+50i)$ K, $i = 1, 2, 3$

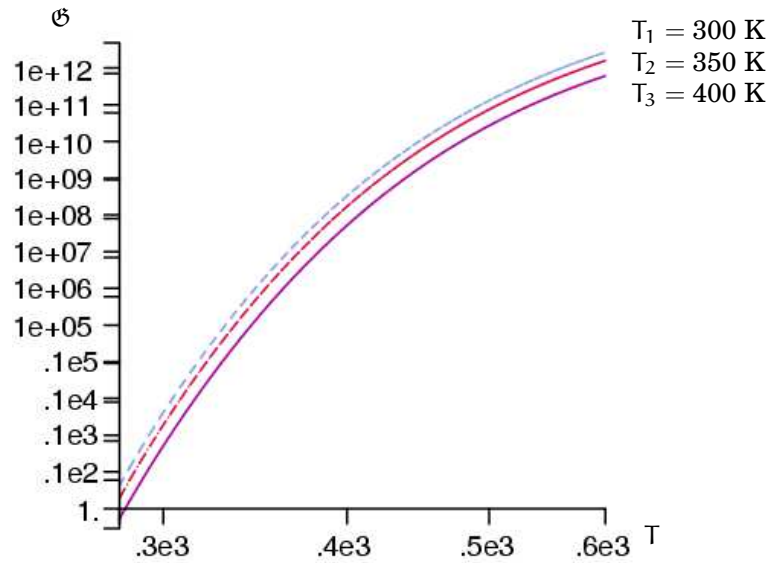

 FIG. 6.4.: Vitesse du son $(y, T) \mapsto c^*|_T$ le long de l'isotherme $T = 600 \text{ K}$

À la figure 6.5 à la page suivante on voit que la loi de changement de phase pour l'eau vérifie aussi l'hypothèse 3.3 à la page 91, c'est-à-dire que la dérivée fondamentale est discontinue et toujours positive $\mathfrak{G}_m > 0$.

De plus, bien que \mathfrak{G}_m ne soit pas toujours < 1 , la vitesse du son du mélange à l'équilibre c_m^* est monotone croissante (cf. proposition 3.4 à la page 100).



(a) Dérivée fondamentale $(\tau, T) \mapsto \mathfrak{G}|_T$ le long des trois isothermes correspondantes aux trois températures $T_i = (300+50i)$ K, $i = 1, 2, 3$. Échelle logarithmique



(b) Dérivée fondamentale $(\tau, T) \mapsto \mathfrak{G}|_\tau$ le long des trois isochores correspondantes aux trois volumes $\tau_i = (0.000686+0.009143 i)$ m³/kg, $i = 1, 2, 3$. Échelle logarithmique

FIG. 6.5.: Dérivée fondamentale $(\tau, T) \mapsto \mathfrak{G}$ le long de trois isothermes (figure 6.5a) et le long de trois isochores (figure 6.5b). On remarque qu'elle est toujours positive

TAB. 6.4.: Paramètres du dodécane et de sa vapeur pour une loi d'état de type *Stiffened Gas*

Phase	c_v [J/(kg · K)]	$\bar{\gamma}$	π [Pa]	q [J/kg]	m [J/(kg · K)]
Liquide	1077.7	2.35	4×10^8	0	-18120.679
Vapeur	1956.45	1.025	0	-24485	-39502.978

6.8. Deuxième exemple : dodécane

À titre illustratif et pour montrer que la stratégie adoptée peut s'étendre à des fluides quelconques, on effectue le calcul dans le cas du dodécane et de sa vapeur. La méthode de calcul des paramètres d'une loi de type *stiffened gas* pour le dodécane, donnés au tableau 6.4, est la même utilisée pour l'eau et elle est rappelée en l'annexe 6.A à la page suivante.

6.8.1. Courbe de coexistence

On suit la même démarche que pour l'eau : pour calculer une approximation de la courbe de coexistence on considère une discrétisation de la température $\{T^i = 295 + 2i\}_{i=1}^{99}$ où la température est mesurée en K ; on calcule ensuite les valeurs de la pression de saturation en ces points $\{p^{\text{sat}}(T^i)\}_{i=1}^{99}$ en résolvant numériquement l'équation $g_{\text{liq}}(P, T^i) = g_{\text{vap}}(P, T^i)$ pour $i = 1, \dots, 99$; on a donc défini l'ensemble de points

$$\mathfrak{A} \stackrel{\text{def}}{=} \{(T^i, p^{\text{sat}}(T^i))\}_{i=1}^{99}.$$

En observant dans le plan (T, P) l'ensemble \mathfrak{A} il est naturel de choisir $T \mapsto \hat{p}^{\text{sat}}$ sous la forme de l'exponentielle d'un polynôme :

$$T \mapsto \hat{p}^{\text{sat}} = \exp \left(\sum_{k=0}^{k=n} a_k T^k \right), \quad n \geq 0.$$

En faisant varier le coefficient n et en donnant différents poids aux points de l'ensemble \mathfrak{A} afin d'avoir une erreur relative minimale et globalement «homogène» dans tout l'intervalle de température $[297, 493]$, on obtient des bonnes approximations avec $n = 4$ et les coefficients suivants :

$$\begin{aligned} a_0 &= -79.818549 & a_1 &= 5.959077 \times 10^{-1} & a_2 &= -1.589373 \times 10^{-3} \\ a_3 &= 2.036710 \times 10^{-6} & a_4 &= -1.027005 \times 10^{-5} \end{aligned}$$

Suivant la même démarche utilisée pour l'eau, on obtient les estimations suivantes :

$$\max_{0 \leq i \leq 83} |p^{\text{sat}}(T^i) - \hat{p}^{\text{sat}}(T^i)| < 41.10 \text{ Pa}, \quad \max_{0 \leq i \leq 83} \frac{|p^{\text{sat}}(T^i) - \hat{p}^{\text{sat}}(T^i)|}{p^{\text{sat}}(T^i)} < 2.75 \times 10^{-3},$$

$$\begin{aligned} \max_{\substack{1 \leq i \leq 99 \\ 0 \leq j \leq 15}} |T^i - \hat{T}^{i,j}| &< 6.1 \times 10^{-2} \text{ K}, & \max_{\substack{1 \leq i \leq 99 \\ 0 \leq j \leq 15}} \frac{|T^i - \hat{T}^{i,j}|}{T^i} &< 1.4 \times 10^{-4}, \\ \max_{\substack{1 \leq i \leq 99 \\ 0 \leq j \leq 15}} |y^j - \hat{y}^{i,j}| &< 4.6 \times 10^{-4}. \end{aligned}$$

6.9. Conclusion

Dans ce chapitre on a introduit la loi d'état *Stiffened Gas*. Dans un premier temps on a donné les éléments constitutants de cette loi d'état pour un fluide monophasique. On a ensuite construit la loi de changement de phase lorsque les deux phases sont décrites par deux lois de type *Stiffened Gas*.

On a vu au chapitre 2 que cette construction peut être ramenée à la résolution d'un système de deux équations en deux inconnues. Dans le cas de deux *Stiffened Gas* on a alors mise en évidence sous quelles conditions on peut simplifier ultérieurement ce système pour obtenir une seule équation et, dans les cas pour lesquels cette simplification n'est plus possible, on en a proposé une version approchée.

On a terminé par la présentation des calculs de l'équation de changement de phase pour deux fluides particuliers (l'eau et le dodécane) et on a pu vérifier l'excellent accord entre le calcul exact de la loi de changement de phase et le calcul approché.



Annexe 6.A Calcul des paramètres à partir de données expérimentales

On illustre ici la méthode utilisée par Le Metayer [65], Le Metayer *et al.* [66] pour calculer les paramètres d'une loi d'état de type *stiffened gas* ($\bar{\gamma}$, π , c_v , q et m) à partir des données expérimentales. Il est évident que la façon de déterminer les paramètres des lois d'état est différente selon l'application étudiée (par exemple on peut vouloir être très précis sur la vitesse du son ou bien sur la compressibilité etc.). Pour nos applications de changement de phase par nucléation, les données expérimentales fondamentales sont les courbes de saturation et nous rappellerons ici comment obtenir ces coefficients à partir de l'étude de ces courbes.

Rappelons d'abord qu'à chaque valeur de la température correspond une unique pression et un unique potentiel chimique. Par ailleurs, à chaque état d'équilibre, correspond un unique volume massique et une unique enthalpie massique pour chaque phase.

★ **REMARQUE 6.4.** Le Metayer [65], Le Metayer *et al.* [66] utilisent un coefficient q' qui correspond à $q' = m + c_v \bar{\gamma} \ln c_v + c_v \Gamma \ln \Gamma$ avec notre notation. ❀

Considérons d'abord les courbes expérimentales (sous forme tabulée) $P = P^{\text{sat},e}(T)$, $h_\alpha^{\text{sat},e}(T)$ et $\tau_\alpha^{\text{sat},e}(T)$, α étant liq ou vap, des tables de Lemmon *et al.* [69] qu'on a reporté à l'annexe 7.A à la page 207. Il s'agit de calculer les coefficients $\bar{\gamma}_\alpha$, π_α , $c_{v,\alpha}$, q_α et q'_α pour les deux phases afin de satisfaire le mieux possible ces valeurs expérimentales.

☛ *Calcul de q_α et du produit $c_{p,\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} \bar{\gamma}_\alpha c_{v,\alpha}$.*

L'expression de la loi $T \mapsto h_\alpha^{\text{sat}}(T)$ s'écrit, pour une phase α vérifiant une loi de type *stiffened gas* :

$$h_\alpha^{\text{sat}}(T) = \bar{\gamma}_\alpha c_{v,\alpha} T + q_\alpha.$$

Pour tout α , il s'agit donc de calculer deux constantes (le produit $\bar{\gamma}_\alpha c_{v,\alpha}$ et la constante q_α) pour que cette droite colle le plus possible aux courbes expérimentales. Pour cela Le Metayer [65], Le Metayer *et al.* [66] utilisent deux états de référence T_0 et T_1 et ils posent

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}_\alpha c_{v,\alpha} &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{h_\alpha^{\text{sat},e}(T_1) - h_\alpha^{\text{sat},e}(T_0)}{T_1 - T_0}, \\ q_\alpha &\stackrel{\text{def}}{=} h_\alpha^{\text{sat},e}(T_0) - \bar{\gamma}_\alpha c_{v,\alpha} T_0. \end{aligned}$$

Ils obtiennent le tableau suivant

Fluide	T_0 [K]	T_1 [K]	$\bar{\gamma}c_v$ [J/(kg · K)]	q [J/kg]
Eau liquide	298	473	4267	-1167×10^3
Vapeur d'eau	298	473	1487	2030×10^3
Dodécane liquide	298	473	2534.46	-755.269×10^3
Vapeur de dodécane	298	473	2005.26	-237.547×10^3

☛ *Calcul de π_α .*

Le volume molaire théorique de chaque phase α à saturation $T \mapsto \tau_\alpha^{\text{sat}}(T)$ s'écrit

$$\tau_\alpha^{\text{sat}}(T) = \frac{c_{p,\alpha} - c_{v,\alpha}}{P^{\text{sat}}(T) + \pi_\alpha} T.$$

En l'exprimant sous forme logarithmique on obtient

$$\ln(\tau_\alpha^{\text{sat}}(T)) = \ln(c_{p,\alpha} - c_{v,\alpha}) - \ln(P^{\text{sat}}(T) + \pi_\alpha) + \ln(T)$$

et en le différenciant on a

$$\frac{d \ln(\tau_\alpha^{\text{sat}}(T))}{dT} = -\frac{d \ln(P^{\text{sat}}(T) + \pi_\alpha)}{dT} + \frac{d \ln(T)}{dT}.$$

Il s'agit donc de calculer la constante π_α pour que la fonction $\tau_\alpha^{\text{sat}}(T)$ colle le plus possible aux courbes expérimentales $\tau_\alpha^{\text{sat},e}(T)$. En utilisant deux états de référence T_0 et T_1 , les formes discrètes des dérivées précédentes s'écrivent

$$\ln\left(\frac{\tau_\alpha^{\text{sat}}(T_1)}{\tau_\alpha^{\text{sat}}(T_0)}\right) = -\ln\left(\frac{P^{\text{sat}}(T_1) + \pi_\alpha}{P^{\text{sat}}(T_0) + \pi_\alpha}\right) + \ln\left(\frac{T_1}{T_0}\right)$$

et donc

$$\frac{\tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T_1)}{\tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T_0)} = \frac{P^{\text{sat}}(T_0) + \pi_{\alpha}}{P^{\text{sat}}(T_1) + \pi_{\alpha}} \cdot \frac{T_1}{T_0}$$

d'où l'expression du coefficient π_{α} pour les deux phases :

$$\pi_{\alpha} = \frac{\tau_{\alpha}^{\text{sat},e}(T_0)T_1P^{\text{sat},e}(T_0) - \tau_{\alpha}^{\text{sat},e}(T_1)T_0P^{\text{sat},e}(T_1)}{\tau_{\alpha}^{\text{sat},e}(T_1)T_0 - \tau_{\alpha}^{\text{sat},e}(T_0)T_1}.$$

Ils obtiennent

Fluide	T_0 [K]	T_1 [K]	π [Pa]
Eau liquide	439	588	10^9
Vapeur d'eau	298	473	0
Dodécane liquide	423	608	4×10^8
Vapeur de dodécane	298	473	0

On remarque que pour avoir une meilleure approximation ils ont choisi deux autres points de référence T_0 et T_1 pour la phase liquide.

☛ *Calcul de $c_{v,\alpha}$ et donc de $\bar{\gamma}_{\alpha}$.*

Toujours à partir des volumes molaires à saturation, Le Metayer [65], Le Metayer *et al.* [66] posent

$$c_{v,\alpha} = c_{p,\alpha} - \frac{\tau_{\alpha}^{\text{sat},e}(T_0)}{T_0} (P^{\text{sat},e}(T_0) + \pi_{\alpha}),$$

$$\bar{\gamma}_{\alpha} = \frac{c_{p,\alpha}}{c_{v,\alpha}}$$

et ils obtiennent

Fluide	T_0 [K]	T_1 [K]	$\bar{\gamma}$	c_v [J/(kg · K)]
Eau liquide	439	588	2.35	1816
Vapeur d'eau	298	473	1.43	1040
Dodécane liquide	423	608	2.35	1077.7
Vapeur de dodécane	298	473	1.025	1956.45

☛ *Calcul de q'_{α} .*

Pour calculer ces constantes (qui interviennent dans l'expression du potentiel chimique g_{α}) il ne reste à utiliser que la courbe de coexistence expérimentale $P = P^{\text{sat},e}(T)$. Le potentiel chimique g_{α} , avec la loi de type *stiffened gas*, s'écrit

$$g_{\alpha} = (c_{p,\alpha} - q'_{\alpha})T - c_{p,\alpha}T \ln T + (c_{p,\alpha} - c_{v,\alpha})T \ln(P + \pi_{\alpha}) + q_{\alpha}.$$

En égalisant les potentiels des deux phases on obtient la relation théorique cherchée

$$A \ln(P + \pi_{\text{vap}}) - B \ln(P + \pi_{\text{liq}}) - C \ln T + \frac{D}{T} + E = 0$$

où les coefficients sont donnés par

$$\begin{aligned}
 A &= c_{p_{\text{vap}}} - c_{v_{\text{vap}}} = \Gamma_{\text{vap}} c_{v_{\text{vap}}}, \\
 B &= c_{p_{\text{liq}}} - c_{v_{\text{liq}}} = \Gamma_{\text{liq}} c_{v_{\text{liq}}}, \\
 C &= c_{p_{\text{vap}}} - c_{p_{\text{liq}}} = \bar{\gamma}_{\text{vap}} c_{v_{\text{vap}}} - \bar{\gamma}_{\text{liq}} c_{v_{\text{liq}}}, \\
 D &= q_{\text{vap}} - q_{\text{liq}}, \\
 E &= (c_{p_{\text{vap}}} - q'_{\text{vap}}) - (c_{p_{\text{liq}}} - q'_{\text{liq}}) = (c_{p_{\text{vap}}} - c_{p_{\text{liq}}}) + (q'_{\text{liq}} - q'_{\text{vap}}).
 \end{aligned}$$

La seule inconnue est la différence $q'_{\text{liq}} - q'_{\text{vap}}$ dans le coefficient E ; ils proposent donc de fixer $q'_{\text{liq}} = 0$ et de chercher q'_{vap} de telle sorte que les courbes expérimentale et théorique soient les plus proches possibles ; ils choisissent pour cela

Fluide	$q' \text{ [J/(kg} \cdot \text{K)]}$
Eau liquide	0
Vapeur d'eau	-23000
Dodécane liquide	0
Vapeur de dodécane	-24485

Annexe 6.B Comparaison avec les données expérimentales pour l'eau

Pour tracer la courbe de coexistence obtenue avec la loi *stiffened gas* on résout numériquement l'équation $g_{\text{liq}}(P, T) = g_{\text{vap}}(P, T)$ pour des températures et pressions comprises entre le point triple ($T = 273.16 \text{ K}$, $P = 0.000612 \text{ MPa}$) et le point critique ($T = 647.096 \text{ K}$, $P = 22.0640 \text{ MPa}$). Sur la figure 6.6a à la page suivante on peut remarquer que les courbes théorique (*stiffened*) et expérimentale (Lemmon *et al.* [69]) semblent être confondues dans un intervalle plutôt large de température mais en regardant l'erreur relative

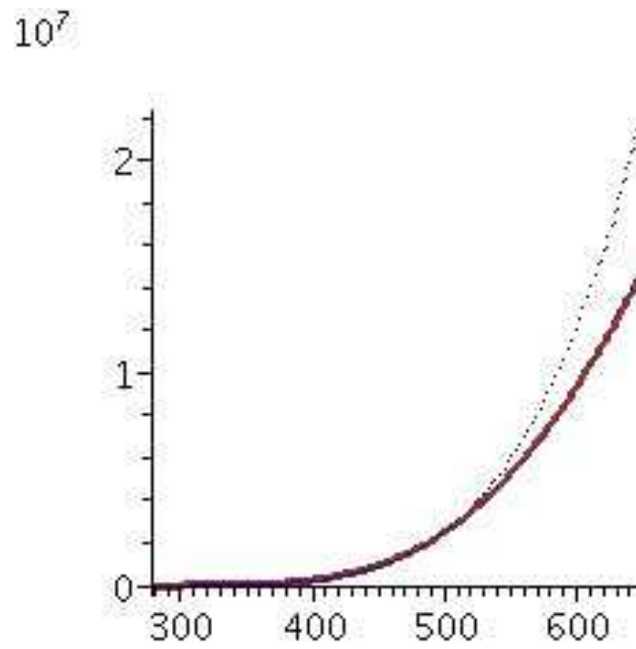
$$\frac{|p^{\text{sat}}(T_i) - p^{\text{sat,e}}(T_i)|}{p^{\text{sat,e}}(T_i)}$$

on remarque qu'elle est inférieure à 10% seulement pour des températures appartenant à l'intervalle [452 K, 542 K] (fig. 6.6b à la page suivante). Toutefois elle reste acceptable (inférieure à 25%) dans un intervalle de température plutôt large : [350 K, 608 K].

De la même façon que pour la courbe de coexistence, on représente les courbes à saturation (en fonction de la température) obtenues avec ces lois théoriques (*stiffened*) et on les compare avec les données expérimentales de Lemmon *et al.* [69] pour des températures appartenant à l'intervalle [278 K, 647 K] :

- ☛ $\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}$: sur la figure 6.7 à la page 192 on peut remarquer que les courbes théorique (*stiffened*) et expérimentale (Lemmon *et al.* [69]) donnent une erreur relative

$$\frac{|\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_i) - \tau_{\text{liq}}^{\text{sat,e}}(T_i)|}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat,e}}(T_i)}$$



(a) Courbe de coexistence avec la loi stiffened (ligne) et données expérimentales (pointillés)

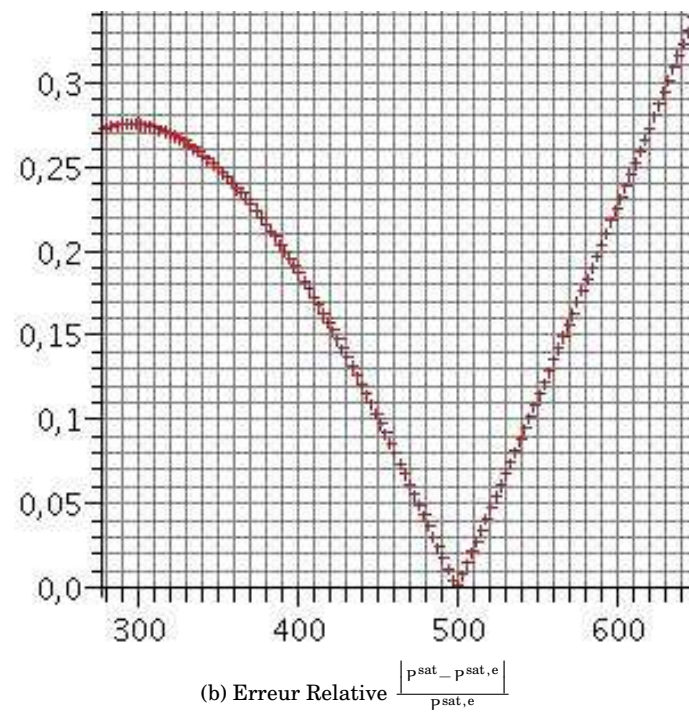


FIG. 6.6.: Courbe de coexistence $T[\text{K}] \mapsto P^{\text{sat}}[\text{Pa}]$: loi stiffened vs données expérimentales

inférieure à 10% pour des températures appartenant à l'intervalle [389 K, 614 K] ;

- ☛ $\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}$: sur la figure 6.8 à la page suivante on peut remarquer que les courbes théorique (stiffened) et expérimentale (Lemmon *et al.* [69]) sont confondues ; en effet l'erreur relative

$$\frac{|\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_i) - \varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat,e}}(T_i)|}{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat,e}}(T_i)}$$

est inférieure à 10% pour des températures appartenant à l'intervalle [278 K, 620 K] ;

- ☛ $h_{\text{liq}}^{\text{sat}}$: sur la figure 6.9 à la page suivante on peut remarquer que les courbes théorique (stiffened) et expérimentale (Lemmon *et al.* [69]) sont elles aussi confondues : l'erreur relative

$$\frac{|h_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_i) - h_{\text{liq}}^{\text{sat,e}}(T_i)|}{h_{\text{liq}}^{\text{sat,e}}(T_i)}$$

est inférieure à 10% pour des températures appartenant à l'intervalle [278 K, 617 K] ;

- ☛ $\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}$: bien que sur la figure 6.10 à la page 193 les courbes théorique (stiffened) et expérimentale (Lemmon *et al.* [69]) semblent être confondues, en regardant l'erreur relative

$$\frac{|\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat,e}}(T_i)|}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat,e}}(T_i)}$$

on remarque qu'elle est inférieure à 10% seulement pour des températures appartenant à l'intervalle [434 K, 494 K] ;

- ☛ $\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}$: sur la figure 6.11 à la page 193 on peut remarquer que les courbes théorique (stiffened) et expérimentale (Lemmon *et al.* [69]) sont confondues : l'erreur relative

$$\frac{|\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i) - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat,e}}(T_i)|}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat,e}}(T_i)}$$

est inférieure à 10% pour des températures appartenant à l'intervalle [278 K, 620 K] ;

- ☛ $h_{\text{vap}}^{\text{sat}}$: sur la figure 6.12 à la page 193 on peut remarquer que les courbes théorique (stiffened) et expérimentale (Lemmon *et al.* [69]) sont elles aussi confondues : l'erreur relative

$$\frac{|h_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i) - h_{\text{vap}}^{\text{sat,e}}(T_i)|}{h_{\text{liq}}^{\text{sat,e}}(T_i)}$$

est inférieure à 10% pour des températures appartenant à l'intervalle [278 K, 602 K].

Les remarques ci-dessus suggèrent de considérer la loi stiffened (avec les constantes du tableau 6.3 à la page 176) comme une bonne approximation du comportement de l'eau en changement de phase seulement pour un intervalle de température plutôt restreint (à cause de l'erreur commise sur le volume de la vapeur à saturation), à savoir l'intervalle [434 K, 494 K]. Toutefois on voit que l'erreur relative sur le volume à saturation de la vapeur reste inférieure à 25% pour des températures appartenant à l'intervalle [278 K, 524 K].

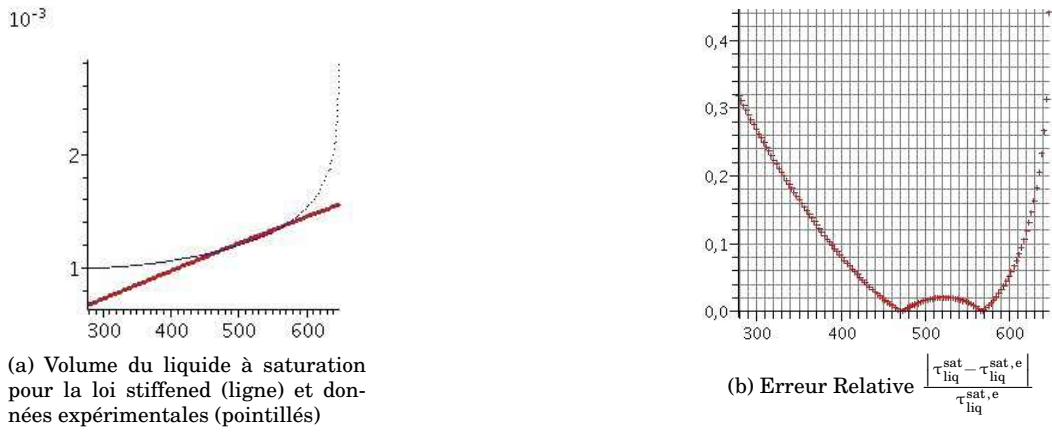


FIG. 6.7.: Volume du liquide à saturation $T[\text{K}] \mapsto \tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}[\text{m}^3/\text{kg}]$: loi stiffened VS données expérimentales

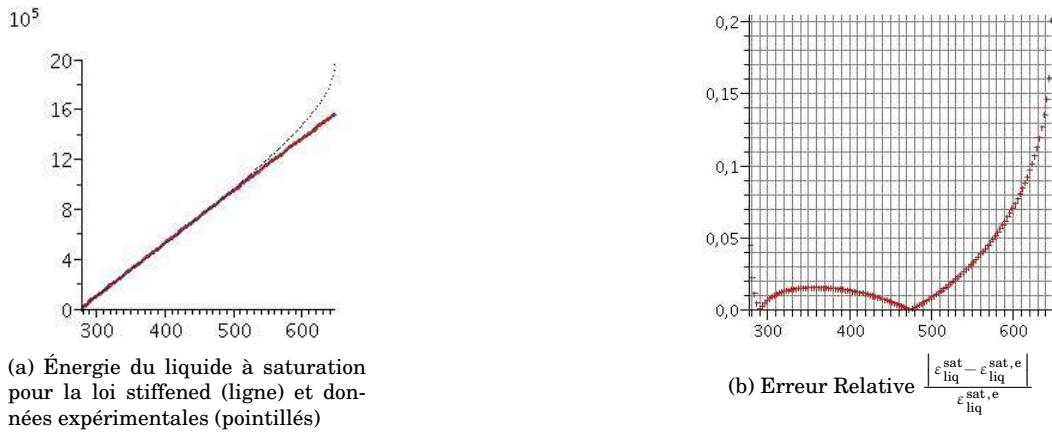


FIG. 6.8.: Énergie du liquide à saturation $T[\text{K}] \mapsto \epsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}[\text{J/kg}]$: loi stiffened VS données expérimentales

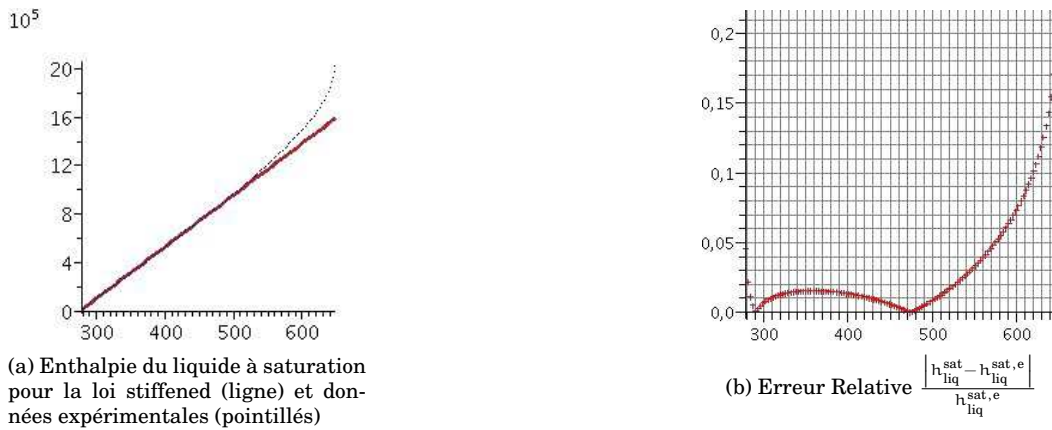


FIG. 6.9.: Enthalpie du liquide à saturation $T[\text{K}] \mapsto h_{\text{liq}}^{\text{sat}}[\text{J/kg}]$: loi stiffened VS données expérimentales

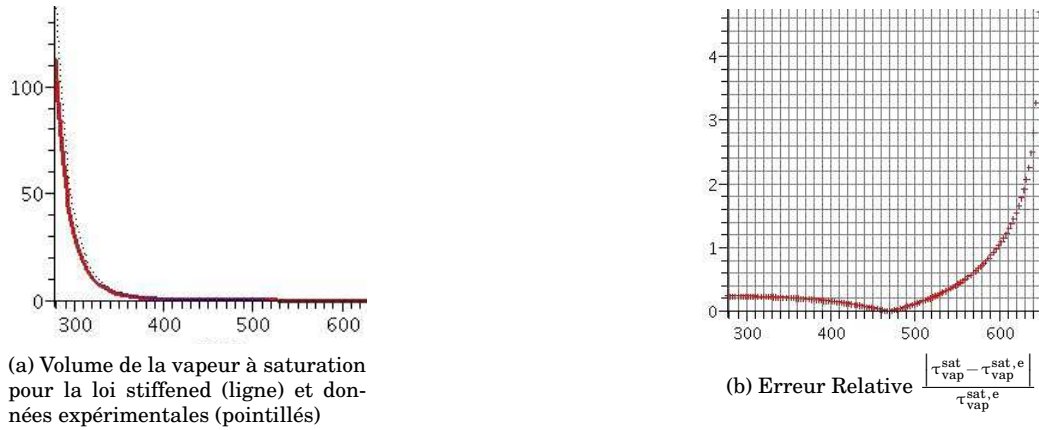


FIG. 6.10.: Volume de la vapeur à saturation $T[\text{K}] \mapsto \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}[\text{m}^3/\text{kg}]$: loi stiffened vs données expérimentales

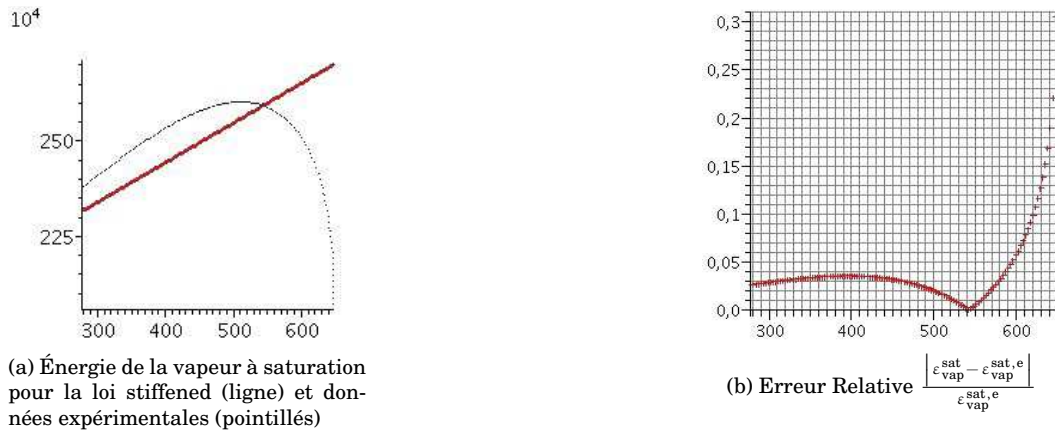


FIG. 6.11.: Énergie de la vapeur à saturation $T[\text{K}] \mapsto \epsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}[\text{J/kg}]$: loi stiffened vs données expérimentales

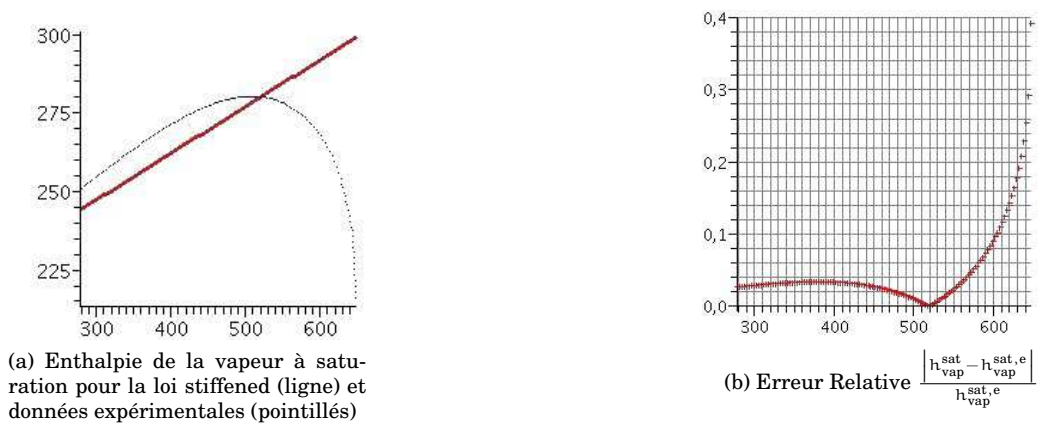


FIG. 6.12.: Enthalpie de la vapeur à saturation $T[\text{K}] \mapsto h_{\text{vap}}^{\text{sat}}[\text{J/kg}]$: loi stiffened vs données expérimentales

CHAPITRE 7

Lois Tabulées

7.1 Loi de changement de phase	195
7.1.1 Approximation	197
7.1.2 Choix des fonctions approximantes	198
7.2 Premier exemple : cas de l'eau.	199
7.3 Deuxième exemple : cas du dodécane	203
7.4 Conclusion.	206
Annexes	207
7.A Données expérimentales	207

Résumé

DANS CE CHAPITRE on introduit une stratégie générale pour la construction de la loi de changement de phase lorsque les deux phases sont décrites par des données expérimentales. On présente ensuite le calcul de cette loi d'état pour deux fluides particuliers : l'eau et sa vapeur d'abord, le dodécane et sa vapeur ensuite. Le choix de ces fluides est lié à leur importance dans l'industrie, notamment pour la description des écoulements en changement de phase dans les réacteurs nucléaires à eau pressurisée pour le premier fluide et dans l'injection de carburant pour le deuxième. Les accords entre le calcul exact de la loi de changement de phase et le calcul approché sont excellents.

7.1. Loi de changement de phase

On a vu au chapitre 2 que la loi d'état de changement de phase $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$ est ainsi définie : pour tout couple $(\tau, \varepsilon) \in \mathcal{C}$,

❶ si $(\tau_{\text{liq}}^*, \varepsilon_{\text{liq}}^*, \tau_{\text{vap}}^*, \varepsilon_{\text{vap}}^*, y^*)$ est solution du système

$$\begin{cases} P_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = P_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) \end{cases} \quad (7.1a)$$

$$\begin{cases} T_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = T_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) \end{cases} \quad (7.1b)$$

$$\begin{cases} g_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}, \varepsilon_{\text{liq}}) = g_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}, \varepsilon_{\text{vap}}) \end{cases} \quad (7.1c)$$

$$\begin{cases} \varepsilon = y \varepsilon_{\text{liq}} + (1 - y) \varepsilon_{\text{vap}} \end{cases} \quad (7.1d)$$

$$\begin{cases} \tau = y \tau_{\text{liq}} + (1 - y) \tau_{\text{vap}} \end{cases} \quad (7.1e)$$

et $y^* \in]0, 1[$ alors on pose

$$s^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = y^* s_{\text{liq}}(\tau_{\text{liq}}^*, \varepsilon_{\text{liq}}^*) + (1 - y^*) s_{\text{vap}}(\tau_{\text{vap}}^*, \varepsilon_{\text{vap}}^*);$$

❷ si le système (7.1) n'as pas de solution ou bien s'il y a des solutions mais y^* n'est pas dans l'ouvert $]0, 1[$ alors l'état (τ, ε) est un état monophasique et on choisit à quelle phase il appartient selon la règle suivante :

❶ si $s_{\text{liq}}(\tau, \varepsilon) > s_{\text{vap}}(\tau, \varepsilon)$ alors on pose $y^* = 1$, $\tau_{\text{liq}}^* = \tau$, $\varepsilon_{\text{liq}}^* = \varepsilon$ et

$$s^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = s_{\text{liq}}(\tau, \varepsilon),$$

(les valeurs de τ_{vap}^* et $\varepsilon_{\text{vap}}^*$ sont quelconques);

❷ si $s_{\text{liq}}(\tau, \varepsilon) < s_{\text{vap}}(\tau, \varepsilon)$ alors on pose $y^* = 0$, $\tau_{\text{vap}}^* = \tau$, $\varepsilon_{\text{vap}}^* = \varepsilon$ et

$$s^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = s_{\text{vap}}(\tau, \varepsilon),$$

(les valeurs de τ_{liq}^* et $\varepsilon_{\text{liq}}^*$ sont quelconques).

Concentrons-nous donc sur la résolution du système (7.1). On a vu au chapitre précédent que ceci équivaut à résoudre l'équation

$$\frac{\tau - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T) - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} \quad (7.2)$$

avec $\tau_{\alpha}^{\text{sat}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \tau_{\alpha}(T, P^{\text{sat}}(T))$ et $\varepsilon_{\alpha}^{\text{sat}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_{\alpha}(T, P^{\text{sat}}(T))$. Mais cette fois-ci ces quatres fonctions sont connues seulement de façon tabulée.

★ **REMARQUE 7.1.** Dans la formulation (7.2) on a supposé que les données expérimentales sont disponibles en fonction de la température. Si, comme il arrive souvent, elles sont fonctions de la pression, alors l'équation se réécrit tout simplement

$$\frac{\tau - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)}{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) - \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)}{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(P) - \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(P)} \quad (7.3)$$

avec $\tau_{\alpha}^{\text{sat}}(P) \stackrel{\text{def}}{=} \tau_{\alpha}(P, T^{\text{sat}}(P))$ et $\varepsilon_{\alpha}^{\text{sat}}(P) \stackrel{\text{def}}{=} \varepsilon_{\alpha}(P, T^{\text{sat}}(P))$.

Dans la suite on développera l'étude seulement pour le premier cas, sachant que l'adaptation à ce deuxième cas est immédiate. ❀

Lorsqu'on dispose seulement de données expérimentales, la résolution de cette équation n'est pas simple puisqu'on ne dispose pas d'une expression analytique des quatre fonctions $\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)$, $\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)$, $\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)$ et $\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)$. Or, même si en utilisant une résolution numérique il suffirait de chercher ces valeurs dans les tables à chaque itération, cela impliquerait soit des tables très grandes soit des valeurs pas très précises. Nous proposons alors une autre stratégie qui a deux avantages majeurs : d'une part on peut contrôler facilement la précision sans beaucoup de données à stocker et d'autre part les calculs peuvent se faire numériquement, une fois pour toutes, avant de faire les simulations numériques d'écoulements.

7.1.1. Approximation

L'équation (7.2) peut être réécrite sous la forme

$$\frac{\frac{\tau}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} - 1}{\frac{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} - 1} = \frac{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} - 1}{\frac{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} - 1}. \quad (7.4)$$

Une généralisation naturelle de la démarche suivie pour les *Stiffened Gas* est la suivante : à la place de cette équation on résout celle suivante

$$\frac{\tau \cdot p_{\mathfrak{A}}(T) - 1}{p_{\mathfrak{B}}(T) - 1} = \frac{\varepsilon \cdot p_{\mathfrak{C}}(T) - 1}{p_{\mathfrak{D}}(T) - 1} \quad (7.5)$$

où les fonctions $p_j(T)$, $j = \mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \mathfrak{C}, \mathfrak{D}$ sont des «bonnes» approximations des quatre fonctions tabulées

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} &\approx p_{\mathfrak{A}}(T), & \frac{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} &\approx p_{\mathfrak{B}}(T), \\ \frac{1}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} &\approx p_{\mathfrak{C}}(T), & \frac{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} &\approx p_{\mathfrak{D}}(T). \end{aligned}$$

Bien évidemment la précision de la solution de (7.5) par rapport à la solution de (7.4) repose entièrement sur la capacité de ces quatre fonctions à décrire les valeurs expérimentales (et naturellement aussi sur la méthode numérique utilisée pour résoudre l'équation (7.5)).

En conclusion, l'équation de changement de phase approchée (voir définition 2.10 à la page 55) est ainsi définie :

Équation de changement de phase approchée

$$\frac{\tau \cdot p_{\mathfrak{A}}(T) - 1}{p_{\mathfrak{B}}(T) - 1} = \frac{\varepsilon \cdot p_{\mathfrak{C}}(T) - 1}{p_{\mathfrak{D}}(T) - 1}$$

où les fonctions $p_j(T)$, $j = \mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \mathfrak{C}, \mathfrak{D}$ sont des «bonnes» approximations des quatre fonctions tabulées

$$\begin{aligned} p_{\mathfrak{A}}(T) &\approx \frac{1}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}, & p_{\mathfrak{B}}(T) &\approx \frac{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}, \\ p_{\mathfrak{C}}(T) &\approx \frac{1}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}, & p_{\mathfrak{D}}(T) &\approx \frac{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}; \end{aligned}$$

7.1.2. Choix des fonctions approximantes

La façon la plus simple de choisir ces quatre fonctions $T \mapsto p_j(T)$, $j = \mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \mathfrak{C}, \mathfrak{D}$, pour qu'elles collent le plus possible aux courbes expérimentales est d'utiliser des approximations au sens des moindres carrés selon la démarche suivante :

1. on discrétise un intervalle de températures (comprises entre le point triple et le point critique) et on obtient une suite

$$\{T_i\}_i, \quad i = 0, \dots, n;$$

2. on cherche dans les tables les quatre suites de valeurs

$$\{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_i)\}_i, \quad \{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i)\}_i, \quad \{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_i)\}_i, \quad \{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i)\}_i;$$

3. avec les valeurs trouvés dans les tables on définit quatre nouvelles suites

$$a_i \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \frac{1}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i)} \right\}_i, \quad b_i \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \frac{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_i)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i)} \right\}_i, \quad c_i \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \frac{1}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i)} \right\}_i, \quad d_i \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \frac{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_i)}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i)} \right\}_i;$$

4. on définit ensuite les quatre ensembles de points

$$\mathfrak{A} \stackrel{\text{def}}{=} \{(T_i, a_i)\}_i, \quad \mathfrak{B} \stackrel{\text{def}}{=} \{(T_i, b_i)\}_i, \quad \mathfrak{C} \stackrel{\text{def}}{=} \{(T_i, c_i)\}_i, \quad \mathfrak{D} \stackrel{\text{def}}{=} \{(T_i, d_i)\}_i;$$

5. on définit enfin les fonctions p_j , $j = \mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \mathfrak{C}, \mathfrak{D}$, comme des approximations au sens des moindres carrés sur ces quatre ensembles.

On voit donc que le problème de calculer la loi de changement de phase est réduit aux choix de quatre fonctions de régression. À titre d'exemple nous allons présenter cette construction pour le cas des tables de l'eau et du dodécane (les tables utilisées sont celles issues de Lemmon *et al.* [69] qu'on a reportées en annexe aux pages 207 et suivantes).

7.2. Premier exemple : cas de l'eau

On cherche quatre approximations des quatre fonctions

$$\frac{1}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}, \quad \frac{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}, \quad \frac{1}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}, \quad \frac{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)},$$

sur l'intervalle de température [281, 524] K.

Pour cela on discrétise cet intervalle de température en posant

$$T_i \stackrel{\text{def}}{=} 278 + 3i, \quad i = 1, \dots, 83$$

et on fait une approximation au sens des moindres carrés sur les quatre ensembles

$$\mathfrak{A} \stackrel{\text{def}}{=} \{(T_i, a_i)\}, \quad \mathfrak{B} \stackrel{\text{def}}{=} \{(T_i, b_i)\}, \quad \mathfrak{C} \stackrel{\text{def}}{=} \{(T_i, c_i)\}, \quad \mathfrak{D} \stackrel{\text{def}}{=} \{(T_i, d_i)\},$$

avec

$$a_i \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \frac{1}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i)} \right\}, \quad b_i \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \frac{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_i)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i)} \right\}, \quad c_i \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \frac{1}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i)} \right\}, \quad d_i \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \frac{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_i)}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i)} \right\}.$$

Des bonnes approximations¹ de ces quatre fonctions à saturation sont

$$f_{\mathfrak{A}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} \approx p_{\mathfrak{A}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \exp \left(\sum_{k=-1}^{k=8} \theta_k T^k \right), \quad (7.6)$$

$$f_{\mathfrak{B}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} \approx p_{\mathfrak{B}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \exp \left(\sum_{k=-9}^{k=9} \omega_k T^k \right), \quad (7.7)$$

$$f_{\mathfrak{C}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} \approx p_{\mathfrak{C}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=0}^{k=6} \delta_k T^k, \quad (7.8)$$

$$f_{\mathfrak{D}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} \approx p_{\mathfrak{D}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=-7}^{k=7} \chi_k T^k, \quad (7.9)$$

avec les coefficients θ_k , ω_k , δ_k et χ_k écrits au tableau 7.1 à la page suivante.

À la figure 7.1 à la page 201 on a représenté les points expérimentaux $f_j(T_i)$ des tables (pointillés) ainsi que les fonctions $p_j(T)$ (lignes); on a aussi représenté les erreurs ponctuelles absolues et relatives pour chacune de ces quatre fonctions; enfin on a calculé le maximum de ces erreurs (voir tableau 7.2 à la page suivante). On voit donc que les fonctions p_j sont des excellentes approximations des valeurs à saturation des volumes et des énergies internes pour l'eau et sa vapeur.

¹On considère qu'une approximation est «bonne» si le résidu en tout T_i est petit et si l'erreur relative est petite et globalement homogène.

TAB. 7.1.: Coefficients des fonctions p_j , $j = \mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \mathfrak{C}, \mathfrak{D}$, pour l'eau et sa vapeur

k	θ_k	ω_k	δ_k	χ_k
-9		$3,436 \times 10^{24}$		
-8		$-3,623 \times 10^{21}$		
-7		$5,197 \times 10^{18}$		$4,008 \times 10^{18}$
-6		$4,879 \times 10^{16}$		$-3,903 \times 10^{16}$
-5		$-4,472 \times 10^{13}$		$-1,782 \times 10^{14}$
-4		$-5,153 \times 10^{11}$		$3,695 \times 10^{12}$
-3		$-2,059 \times 10^9$		$-1,387 \times 10^{10}$
-2		$1,256 \times 10^7$		$-1,743 \times 10^7$
-1	$-4,212 \times 10^3$	$2,448 \times 10^4$		$1,941 \times 10^5$
0	$-3,172 \times 10^1$	$-1,949 \times 10^2$	$6,724 \times 10^{-7}$	$1,524 \times 10^2$
1	$6,078 \times 10^{-1}$	$5,116 \times 10^{-2}$	$-0,318 \times 10^{-9}$	$-4,027 \times 10^0$
2	$-4,167 \times 10^{-3}$	$7,768 \times 10^{-4}$	$1,942 \times 10^{-11}$	$1,295 \times 10^{-2}$
3	$1,751 \times 10^{-5}$	$1,046 \times 10^{-6}$	$-6,844 \times 10^{-14}$	$-1,461 \times 10^{-5}$
4	$-4,806 \times 10^{-8}$	$-8,709 \times 10^{-9}$	$1,343 \times 10^{-16}$	$1,079 \times 10^{-8}$
5	$8,636 \times 10^{-11}$	$7,531 \times 10^{-12}$	$1,385 \times 10^{-19}$	$4,868 \times 10^{-11}$
6	$-9,785 \times 10^{-14}$	$2,382 \times 10^{-14}$	$5,957 \times 10^{-22}$	$-5,168 \times 10^{-13}$
7	$6,336 \times 10^{-17}$	$-6,084 \times 10^{-17}$		$1,957 \times 10^{-17}$
8	$-1,784 \times 10^{-20}$	$5,373 \times 10^{-20}$		
9		$-1,726 \times 10^{-23}$		

 TAB. 7.2.: Erreurs commises en utilisant les fonctions p_j au lieu des valeurs f_j des tables pour l'eau et sa vapeur

j	f_j	p_j	$\max_i f_j(T_i) - p_j(T_i) $	$\max_i \frac{ f_j(T_i) - p_j(T_i) }{f_j(T_i)}$
\mathfrak{A}	$\frac{1}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}$	$\exp\left(\sum_{k=-1}^{k=8} \theta_k T^k\right)$	3.30×10^{-4}	3.95×10^{-5}
\mathfrak{B}	$\frac{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}$	$\exp\left(\sum_{k=-9}^{k=9} \omega_k T^k\right)$	8.67×10^{-7}	8.42×10^{-5}
\mathfrak{C}	$\frac{1}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}$	$\sum_{k=0}^{k=6} \delta_k T^k$	9.03×10^{-12}	2.22×10^{-5}
\mathfrak{D}	$\frac{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}$	$\sum_{k=-7}^{k=7} \chi_k T^k$	1.51×10^{-5}	5.15×10^{-5}

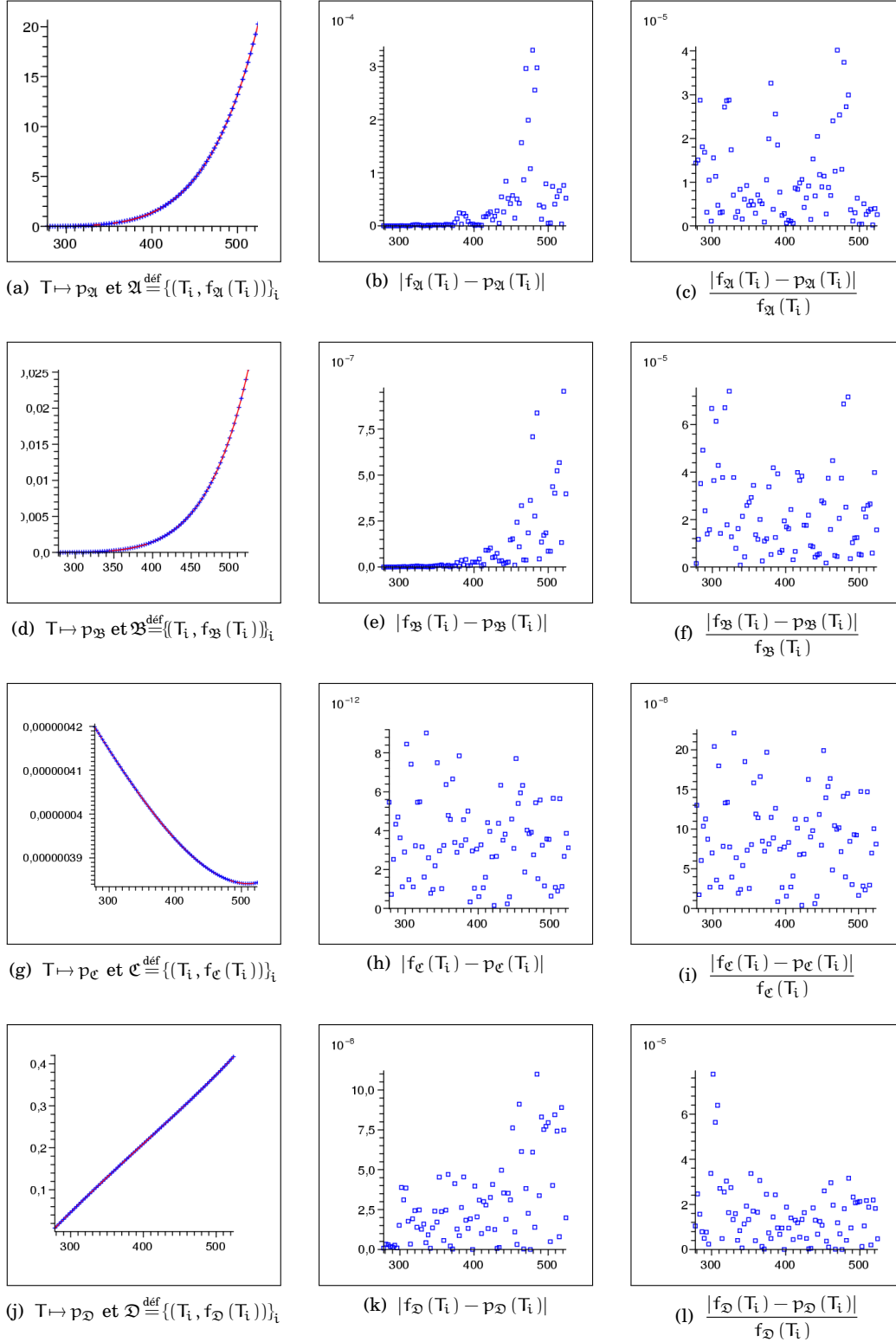


FIG. 7.1.: Comparaisons entre les fonctions approximantes $T \mapsto p_j$ (lignes) et les valeurs expérimentales des ensembles $\{(T_i, f_j(T_i))\}_i$ (croix) pour $j = A, B, C, D$ et calcul des erreurs absolues $|f_j(T_i) - p_j(T_i)|$ et relatives $|f_j(T_i) - p_j(T_i)| / f_j(T_i)$

On vérifie maintenant que ces erreurs, même si très petites, ne dégradent pas trop la solution du système de changement de phase. Pour cela, pour un même couple (τ, ε) on résout d'abord l'équation (7.4) et on compare cette solution avec la solution de l'équation (7.5). Pour s'assurer que le couple (τ, ε) est un état de mélange et pour connaître la solution exacte de (7.4) on suit la démarche suivante :

1. on discrétise l'intervalle de températures $[281, 530]$ K par

$$T_q \stackrel{\text{def}}{=} (278 + 3q) \text{K}, \quad q = 1, \dots, 83;$$

2. on discrétise la fraction volumique $y \in [0, 1]$ par

$$y_r \stackrel{\text{def}}{=} \frac{r-1}{14}, \quad r = 1, \dots, 15;$$

3. on obtient ainsi une matrice d'éléments (T_q, y_r) ;
4. pour toute entrée de cette matrice on définit le couple $(\tau_{(q,r)}, \varepsilon_{(q,r)})$ ainsi

$$\begin{cases} \tau_{(q,r)} \stackrel{\text{def}}{=} y_r \tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_q) + (1 - y_r) \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_q), \\ \varepsilon_{(q,r)} \stackrel{\text{def}}{=} y_r \varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_q) + (1 - y_r) \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_q), \end{cases}$$

où les valeurs $\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_q)$, $\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_q)$, $\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_q)$ et $\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_q)$ sont celles issus des tables expérimentales (voir l'annexe 7.A à la page 207).

Donc, pour tout couple $(\tau_{(q,r)}, \varepsilon_{(q,r)})$ (qui par définition est un état de mélange à l'équilibre),

- ☛ la solution exacte de l'équation (7.4) est bien évidemment (T_q, y_r) par construction,
- ☛ la solution $(\hat{T}_{(q,r)}, \hat{y}_{(q,r)})$ de l'équation (7.5) est obtenue numériquement (par exemple avec le logiciel Maple qui permet une précision arbitraire, ici 10^{-40} près).

Puisque l'erreur de la résolution numérique est négligeable, on va alors calculer les erreurs commises sur la résolution du système de changement de phase dues uniquement au fait d'utiliser les fonctions p_j au lieu des valeurs expérimentales (au cas où elles seraient disponibles pour n'importe quelle température). On a les majorations suivantes :

$$\begin{aligned} \max_{\substack{1 \leq q \leq 83 \\ 1 \leq r \leq 15}} |T_q - \hat{T}_{(q,r)}| &< 6.72 \times 10^{-3} \text{ K}, & \max_{\substack{1 \leq q \leq 83 \\ 1 \leq r \leq 15}} \frac{|T_q - \hat{T}_{(q,r)}|}{T_q} &< 1.29 \times 10^{-5}, \\ \max_{\substack{1 \leq q \leq 83 \\ 1 \leq r \leq 15}} |y_r - \hat{y}_{(q,r)}| &< 2.79 \times 10^{-5}. \end{aligned}$$

7.3. Deuxième exemple : cas du dodécane

À titre illustratif et pour montrer que la stratégie adoptée peut s'étendre à des fluides quelconques, on effectue le calcul dans le cas du dodécane et de sa vapeur. Les courbes expérimentales issues de la littérature se trouvent, par exemple, dans Lemmon *et al.* [69] et ont été reportées au tableau 7.6 à la page 215.

On cherche quatre approximations des quatre fonctions

$$\frac{1}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}, \quad \frac{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}, \quad \frac{1}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}, \quad \frac{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)},$$

sur l'intervalle de température [492, 657] K.

Pour cela on discrétise cet intervalle de température en posant

$$T_i \stackrel{\text{def}}{=} 489 + 3i, \quad i = 1, \dots, 56$$

et on fait une approximation au sens des moindres carrés sur les quatre ensembles

$$\mathfrak{A} \stackrel{\text{def}}{=} \{(T_i, a_i)\}, \quad \mathfrak{B} \stackrel{\text{def}}{=} \{(T_i, b_i)\}, \quad \mathfrak{C} \stackrel{\text{def}}{=} \{(T_i, c_i)\}, \quad \mathfrak{D} \stackrel{\text{def}}{=} \{(T_i, d_i)\},$$

avec

$$a_i \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \frac{1}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i)} \right\}, \quad b_i \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \frac{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_i)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i)} \right\}, \quad c_i \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \frac{1}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i)} \right\}, \quad d_i \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ \frac{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_i)}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_i)} \right\}.$$

Des bonnes approximations de ces quatre fonctions à saturation sont

$$f_{\mathfrak{A}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} \approx p_{\mathfrak{A}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=0}^{k=9} \theta_k T^k, \quad (7.10)$$

$$f_{\mathfrak{B}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} \approx p_{\mathfrak{B}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=0}^{k=9} \omega_k T^k, \quad (7.11)$$

$$f_{\mathfrak{C}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} \approx p_{\mathfrak{C}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=0}^{k=8} \delta_k T^k, \quad (7.12)$$

$$f_{\mathfrak{D}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)} \approx p_{\mathfrak{D}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=0}^{k=7} \chi_k T^k, \quad (7.13)$$

avec les coefficients θ_k , ω_k , δ_k et χ_k écrits au tableau 7.3.

À la figure 7.2 à la page 205 on a représenté les points expérimentaux $f_j(T_i)$ des tables (pointillés) ainsi que les fonctions $p_j(T)$ (lignes); on a aussi représenté les erreurs ponctuelles absolues et relatives pour chacune de ces quatre fonctions; enfin on a calculé le maximum de ces erreurs (voir le tableau 7.4 à la page suivante). On voit donc que les fonctions p_j sont des très bonnes approximations des valeurs à saturation des volumes et des énergies internes pour le dodécane liquide et sa vapeur.

TAB. 7.3.: Coefficients des fonctions p_j , $j = \mathfrak{A}, \mathfrak{B}, \mathfrak{C}, \mathfrak{D}$, pour le dodécane et sa vapeur

k	θ_k	ϖ_k	δ_k	χ_k
0	$-2,005 \times 10^6$	$-3,213 \times 10^4$	$-3,414 \times 10^{-2}$	$-6,860 \times 10^4$
1	$3,026 \times 10^3$	$2,855 \times 10^2$	$4,055 \times 10^{-4}$	$8,640 \times 10^2$
2	$1,071 \times 10^2$	$-7,907 \times 10^{-1}$	$-1,999 \times 10^{-6}$	$-4,657 \times 10^0$
3	$-6,359 \times 10^{-1}$	$-1,603 \times 10^{-4}$	$+5,150 \times 10^{-9}$	$1,393 \times 10^{-2}$
4	$1,256 \times 10^{-3}$	$4,817 \times 10^{-6}$	$-6,969 \times 10^{-12}$	$-2,496 \times 10^{-5}$
5	$2,997 \times 10^{-7}$	$-7,485 \times 10^{-9}$	$3,423 \times 10^{-15}$	$2,679 \times 10^{-8}$
6	$-5,486 \times 10^{-9}$	$-3,300 \times 10^{-12}$	$2,781 \times 10^{-18}$	$-1,595 \times 10^{-11}$
7	$9,741 \times 10^{-12}$	$+2,030 \times 10^{-14}$	$-4,377 \times 10^{-21}$	$4,063 \times 10^{-15}$
8	$-7,542 \times 10^{-15}$	$-2,078 \times 10^{-17}$	$1,629 \times 10^{-24}$	
9	$2,271 \times 10^{-18}$	$7,196 \times 10^{-21}$		

TAB. 7.4.: Erreurs commises en utilisant les fonctions p_j au lieu des valeurs f_j des tables pour le dodécane et sa vapeur

j	f_j	p_j	$\max_i f_j(T_i) - p_j(T_i) $	$\max_i \frac{ f_j(T_i) - p_j(T_i) }{f_j(T_i)}$
\mathfrak{A}	$\frac{1}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}$	$\sum_{k=0}^{k=9} \theta_k T^k$	4.56×10^0	2.69×10^{-2}
\mathfrak{B}	$\frac{\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}$	$\sum_{k=0}^{k=9} \varpi_k T^k$	2.88×10^{-2}	6.10×10^{-2}
\mathfrak{C}	$\frac{1}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}$	$\sum_{k=0}^{k=8} \delta_k T^k$	3.10×10^{-9}	1.89×10^{-3}
\mathfrak{D}	$\frac{\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T)}{\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T)}$	$\sum_{k=0}^{k=7} \chi_k T^k$	6.40×10^{-3}	8.33×10^{-3}

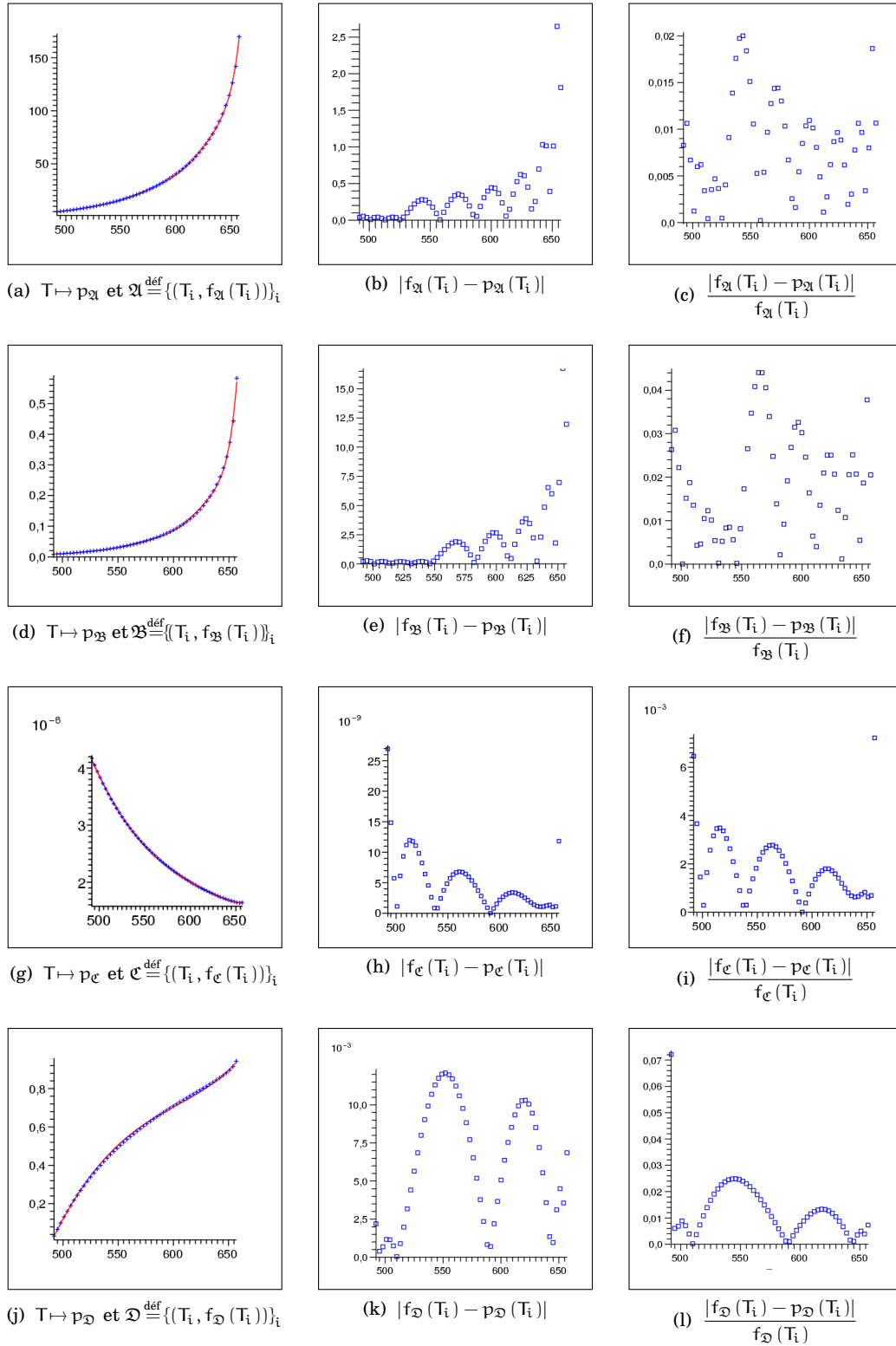


FIG. 7.2.: Comparaisons entre les fonctions approximantes $T \mapsto p_j$ (lignes) et les valeurs expérimentales des ensembles $\{(T_i, f_j(T_i))\}_i$ (croix) pour $j = A, B, C, D$ et calcul des erreurs absolues $|f_j(T_i) - p_j(T_i)|$ et relatives $|f_j(T_i) - p_j(T_i)| / f_j(T_i)$

On vérifie maintenant que ces erreurs, même si très petites, ne dégradent pas trop la solution du système de changement de phase. Pour cela, pour un même couple (τ, ε) on résout d'abord l'équation (7.4) et on compare cette solution avec la solution de l'équation (7.5).

Pour s'assurer que le couple (τ, ε) est un état de mélange et pour connaître la solution de (7.4) on suit la démarche suivante :

1. on discrétise l'intervalle de température $[492, 657]$ K par

$$T_q \stackrel{\text{def}}{=} (489 + 3q)\text{K}, \quad q = 1, \dots, 56;$$

2. on discrétise la fraction volumique $y \in [0, 1]$ par

$$y_r \stackrel{\text{def}}{=} \frac{r-1}{10}, \quad r = 1, \dots, 11;$$

3. on obtient ainsi une matrice d'éléments (T_q, y_r) ;
4. pour toute entrée de cette matrice on définit le couple $(\tau_{(q,r)}, \varepsilon_{(q,r)})$ ainsi

$$\begin{cases} \tau_{(q,r)} \stackrel{\text{def}}{=} y_r \tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_q) + (1 - y_r) \tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_q), \\ \varepsilon_{(q,r)} \stackrel{\text{def}}{=} y_r \varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_q) + (1 - y_r) \varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_q), \end{cases}$$

où les valeurs $\tau_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_q)$, $\tau_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_q)$, $\varepsilon_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_q)$ et $\varepsilon_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_q)$ sont celles issues des tables expérimentales.

Donc, pour tout couple $(\tau_{(q,r)}, \varepsilon_{(q,r)})$,

- ☛ la solution de l'équation (7.4) est bien évidemment (T_q, y_r) par construction,
- ☛ la solution $(\hat{T}_{(q,r)}, \hat{y}_{(q,r)})$ de l'équation (7.5) est obtenue numériquement (par exemple avec le logiciel Maple qui permet une précision arbitraire, ici 10^{-40} près).

Puisque l'erreur de la résolution numérique est négligeable, on va alors calculer les erreurs commises sur la résolution du système de changement de phase dues uniquement au fait d'utiliser les fonctions p_j au lieu des valeurs expérimentales (au cas où elles seraient disponibles pour n'importe quelle température). On a les majorations suivantes :

$$\begin{aligned} \max_{\substack{1 \leq q \leq 56 \\ 1 \leq r \leq 11}} |T_q - \hat{T}_{(q,r)}| &< 0.94 \text{ K}, & \max_{\substack{1 \leq q \leq 56 \\ 1 \leq r \leq 11}} \frac{|T_q - \hat{T}_{(q,r)}|}{T_q} &< 1.52 \times 10^{-3}, \\ \max_{\substack{1 \leq q \leq 56 \\ 1 \leq r \leq 11}} |y_r - \hat{y}_{(q,r)}| &< 1.17 \times 10^{-2}. \end{aligned}$$

7.4. Conclusion

Dans ce chapitre on a introduit une stratégie générale pour la construction de la loi de changement de phase lorsque les deux phases sont décrites par des données expérimentales. On a ensuite présenté le calcul de cette loi d'état pour deux fluides

particuliers (l'eau et le dodécane) et on a pu vérifier l'excellent accord entre le calcul exact de la loi de changement de phase et le calcul approché.



Annexe 7.A Données expérimentales

Dans les deux tableaux qui suivent on reporte les données expérimentales à saturation pour l'eau et le dodécane utilisées dans ce chapitre ainsi qu'au chapitre 6. Ces données sont issues de Lemmon *et al.* [69] (voir aussi Annamalai et Puri [3], Van Wylen et Sonntag [94] et Keenan *et al.* [59]). On remarque les valeurs négatives des énergies internes pour les deux phases du dodécane pour des températures inférieures à 492 K.

À la figure 7.3 à la page 214 on représente les volumes molaires, les énergies internes molaires, les entropies molaires, les enthalpies molaires et la vitesse du son de la phase liquide et de la phase vapeur à saturation pour l'eau pour des températures comprises entre le point triple et le point critique.

À la figure 7.4 à la page 222 on représente les volumes molaires, les énergies internes molaires, les entropies molaires, les enthalpies molaires et la vitesse du son de la phase liquide et de la phase vapeur à saturation pour le dodécane pour des températures comprises entre le point triple et le point critique.

TAB. 7.5.: Propriétés de l'eau à saturation (source Lemmon *et al.* [69]).

T (K)	p _{sat} (MPa)	Volume (m ³ /kg)		Énergie interne (kJ/kg)		Enthalpie (kJ/kg)		Entropie (kJ/(kg · K))	
		τ^{liq}	τ^{vap}	ε^{liq}	ε^{vap}	h^{liq}	h^{vap}	s^{liq}	s^{vap}
275	0,00069845	0,0010001	181,60	7,7590	2377,5	7,7597	2504,3	0,0283	9,1066
278	0,00086349	0,0010001	148,48	20,388	2381,6	20,389	2509,8	0,0739	9,0287
281	0,0010621	0,0010002	122,01	32,996	2385,7	32,997	2515,3	0,1190	8,9528
284	0,0012999	0,0010004	100,74	45,586	2389,8	45,587	2520,8	0,1636	8,8791
287	0,0015835	0,0010008	83,560	58,162	2393,9	58,163	2526,2	0,2077	8,8073
290	0,0019200	0,0010012	69,625	70,727	2398,0	70,729	2531,7	0,2512	8,7374
293	0,0023177	0,0010018	58,267	83,284	2402,1	83,286	2537,2	0,2943	8,6693
296	0,0027856	0,0010025	48,966	95,835	2406,2	95,837	2542,6	0,3369	8,6031
299	0,0033342	0,0010032	41,318	108,38	2410,3	108,38	2548,0	0,3791	8,5385
302	0,0039745	0,0010041	35,002	120,92	2414,4	120,93	2553,5	0,4208	8,4756
305	0,0047193	0,0010050	29,764	133,46	2418,4	133,47	2558,9	0,4621	8,4144
308	0,0055825	0,0010060	25,403	146	2422,5	146,01	2564,3	0,5031	8,3546
311	0,0065792	0,0010071	21,759	158,54	2426,5	158,55	2569,7	0,5436	8,2964
314	0,0077262	0,0010082	18,702	171,08	2430,5	171,09	2575,0	0,5837	8,2396
317	0,0090418	0,0010094	16,129	183,62	2434,5	183,63	2580,4	0,6234	8,1842
320	0,010546	0,0010107	13,954	196,16	2438,5	196,17	2585,7	0,6628	8,1302
323	0,012260	0,0010121	12,111	208,70	2442,5	208,71	2591,0	0,7018	8,0774
326	0,014208	0,0010135	10,544	221,25	2446,5	221,26	2596,3	0,7405	8,0260
329	0,016415	0,0010150	9,2064	233,80	2450,5	233,81	2601,6	0,7788	7,9757
332	0,018909	0,0010165	8,0616	246,35	2454,4	246,37	2606,8	0,8168	7,9267
Continue dans la prochaine page									

TAB. 7.5 – Propriétés de l'eau à saturation, continuation de la page précédente

T (K)	p ^{sat} (MPa)	τ^{liq}	τ^{vap}	ε^{liq}	ε^{vap}	h ^{liq}	h ^{vap}	s ^{liq}	s ^{vap}
335	0,021718	0,0010181	7,0788	258,90	2458,3	258,93	2612,1	0,8544	7,8787
338	0,024874	0,0010198	6,2327	271,46	2462,2	271,49	2617,2	0,8917	7,8319
341	0,028411	0,0010215	5,5020	284,03	2466,1	284,06	2622,4	0,9288	7,7862
344	0,032366	0,0010233	4,8693	296,59	2469,9	296,63	2627,5	0,9655	7,7414
347	0,036776	0,0010251	4,3200	309,17	2473,8	309,21	2632,7	1,0019	7,6977
350	0,041682	0,0010270	3,8419	321,75	2477,6	321,79	2637,7	1,0380	7,6549
353	0,047127	0,0010290	3,4246	334,33	2481,4	334,38	2642,8	1,0738	7,6131
356	0,053158	0,0010310	3,0595	346,93	2485,1	346,98	2647,8	1,1093	7,5722
359	0,059822	0,0010330	2,7393	359,53	2488,9	359,59	2652,7	1,1446	7,5321
362	0,067172	0,0010351	2,4578	372,13	2492,6	372,20	2657,7	1,1795	7,4929
365	0,075260	0,0010373	2,2098	384,75	2496,2	384,82	2662,5	1,2142	7,4545
368	0,084142	0,0010395	1,9908	397,37	2499,9	397,46	2667,4	1,2487	7,4169
371	0,093880	0,0010418	1,7970	410	2503,5	410,10	2672,2	1,2829	7,3801
374	0,10453	0,0010441	1,6251	422,64	2507,0	422,75	2676,9	1,3168	7,3440
377	0,11617	0,0010465	1,4724	435,29	2510,6	435,42	2681,6	1,3505	7,3086
380	0,12885	0,0010490	1,3364	447,96	2514,1	448,09	2686,2	1,3839	7,2738
383	0,14266	0,0010515	1,2150	460,63	2517,5	460,78	2690,8	1,4172	7,2398
386	0,15766	0,0010540	1,1065	473,32	2520,9	473,48	2695,4	1,4502	7,2063
389	0,17393	0,0010566	1,0094	486,01	2524,3	486,20	2699,8	1,4829	7,1735
392	0,19154	0,0010593	0,92223	498,72	2527,6	498,93	2704,3	1,5155	7,1413
395	0,21060	0,0010620	0,84389	511,45	2530,9	511,67	2708,6	1,5478	7,1097
398	0,23117	0,0010648	0,77336	524,19	2534,1	524,44	2712,9	1,5800	7,0786
Continue dans la prochaine page									

TAB. 7.5 – Propriétés de l'eau à saturation, continuation de la page précédente

T (K)	p ^{sat} (MPa)	τ^{liq}	τ^{vap}	ε^{liq}	ε^{vap}	h ^{liq}	h ^{vap}	s ^{liq}	s ^{vap}
401	0,25335	0,0010676	0,70976	536,94	2537,3	537,21	2717,1	1,6119	7,0480
404	0,27722	0,0010705	0,65231	549,71	2540,4	550,01	2721,2	1,6436	7,0180
407	0,30289	0,0010735	0,60033	562,50	2543,5	562,83	2725,3	1,6752	6,9884
410	0,33045	0,0010765	0,55323	575,31	2546,5	575,66	2729,3	1,7065	6,9593
413	0,36001	0,0010796	0,51049	588,13	2549,5	588,52	2733,2	1,7377	6,9307
416	0,39166	0,0010827	0,47164	600,97	2552,4	601,40	2737,1	1,7687	6,9025
419	0,42551	0,0010860	0,43628	613,83	2555,2	614,30	2740,9	1,7995	6,8748
422	0,46167	0,0010892	0,40405	626,72	2558,0	627,22	2744,5	1,8301	6,8474
425	0,50025	0,0010926	0,37463	639,62	2560,7	640,17	2748,1	1,8606	6,8205
428	0,54138	0,0010960	0,34774	652,55	2563,4	653,14	2751,6	1,8909	6,7939
431	0,58516	0,0010995	0,32314	665,50	2566,0	666,14	2755,1	1,9210	6,7677
434	0,63172	0,0011030	0,30059	678,47	2568,5	679,17	2758,4	1,9510	6,7418
437	0,68118	0,0011066	0,27990	691,47	2570,9	692,22	2761,6	1,9809	6,7163
440	0,73367	0,0011103	0,26090	704,50	2573,3	705,31	2764,7	2,0106	6,6911
443	0,78932	0,0011141	0,24343	717,55	2575,6	718,43	2767,8	2,0402	6,6662
446	0,84826	0,0011179	0,22733	730,63	2577,8	731,58	2770,7	2,0696	6,6416
449	0,91063	0,0011218	0,21250	743,74	2580,0	744,76	2773,5	2,0989	6,6173
452	0,97656	0,0011258	0,19881	756,88	2582,1	757,98	2776,2	2,1281	6,5932
455	1,0462	0,0011299	0,18616	770,05	2584,0	771,23	2778,8	2,1571	6,5694
458	1,1197	0,0011341	0,17446	783,25	2585,9	784,52	2781,3	2,1861	6,5458
461	1,1972	0,0011383	0,16363	796,49	2587,8	797,85	2783,7	2,2149	6,5225
464	1,2788	0,0011427	0,15359	809,76	2589,5	811,22	2785,9	2,2436	6,4994
Continue dans la prochaine page									

TAB. 7.5 – Propriétés de l'eau à saturation, continuation de la page précédente

T (K)	p ^{sat} (MPa)	τ^{liq}	τ^{vap}	ϵ^{liq}	ϵ^{vap}	h ^{liq}	h ^{vap}	s ^{liq}	s ^{vap}
467	1,3647	0,0011471	0,14428	823,07	2591,1	824,64	2788,0	2,2722	6,4765
470	1,4551	0,0011517	0,13564	836,42	2592,7	838,09	2790,0	2,3007	6,4538
473	1,5501	0,0011563	0,12760	849,80	2594,1	851,60	2791,9	2,3291	6,4313
476	1,6498	0,0011610	0,12012	863,23	2595,5	865,14	2793,7	2,3574	6,4089
479	1,7545	0,0011659	0,11315	876,69	2596,7	878,74	2795,3	2,3856	6,3868
482	1,8642	0,0011708	0,10666	890,20	2597,9	892,39	2796,7	2,4138	6,3647
485	1,9792	0,0011758	0,10061	903,76	2598,9	906,09	2798,1	2,4418	6,3428
488	2,0997	0,0011810	0,094952	917,36	2599,9	919,84	2799,3	2,4698	6,3211
491	2,2257	0,0011863	0,089668	931,01	2600,7	933,65	2800,3	2,4977	6,2994
494	2,3575	0,0011917	0,084725	944,70	2601,4	947,51	2801,2	2,5256	6,2779
497	2,4953	0,0011972	0,080098	958,45	2602,0	961,44	2801,9	2,5533	6,2565
500	2,6392	0,0012029	0,075764	972,26	2602,5	975,43	2802,5	2,5810	6,2351
503	2,7894	0,0012087	0,071700	986,11	2602,9	989,49	2802,9	2,6087	6,2139
506	2,9461	0,0012147	0,067887	1000,0	2603,1	1003,6	2803,1	2,6363	6,1927
509	3,1095	0,0012208	0,064306	1014,0	2603,2	1017,8	2803,2	2,6639	6,1715
512	3,2798	0,0012270	0,060941	1028,0	2603,2	1032,1	2803,1	2,6914	6,1504
515	3,4571	0,0012334	0,057776	1042,1	2603,0	1046,4	2802,7	2,7189	6,1293
518	3,6417	0,0012400	0,054798	1056,3	2602,7	1060,8	2802,2	2,7464	6,1082
521	3,8338	0,0012468	0,051993	1070,5	2602,2	1075,3	2801,6	2,7739	6,0872
524	4,0336	0,0012537	0,049350	1084,9	2601,6	1089,9	2800,7	2,8013	6,0661
527	4,2412	0,0012609	0,046857	1099,2	2600,8	1104,6	2799,6	2,8287	6,0450
530	4,4569	0,0012682	0,044503	1113,7	2599,9	1119,3	2798,2	2,8561	6,0239
Continue dans la prochaine page									

TAB. 7.5 – Propriétés de l'eau à saturation, continuation de la page précédente

T (K)	p ^{sat} (MPa)	τ^{liq}	τ^{vap}	ε^{liq}	ε^{vap}	h ^{liq}	h ^{vap}	s ^{liq}	s ^{vap}
533	4,6808	0,0012757	0,042281	1128,2	2598,8	1134,2	2796,7	2,8836	6,0027
536	4,9133	0,0012835	0,040181	1142,9	2597,5	1149,2	2794,9	2,9110	5,9814
539	5,1545	0,0012915	0,038195	1157,6	2596,0	1164,2	2792,9	2,9385	5,9601
542	5,4047	0,0012998	0,036315	1172,4	2594,4	1179,4	2790,6	2,9660	5,9387
545	5,6640	0,0013083	0,034535	1187,3	2592,5	1194,7	2788,1	2,9935	5,9171
548	5,9327	0,0013171	0,032848	1202,3	2590,4	1210,1	2785,3	3,0210	5,8955
551	6,2110	0,0013261	0,031248	1217,4	2588,2	1225,7	2782,2	3,0486	5,8736
554	6,4993	0,0013355	0,029731	1232,7	2585,7	1241,3	2778,9	3,0763	5,8517
557	6,7976	0,0013453	0,028289	1248,0	2582,9	1257,2	2775,2	3,1041	5,8295
560	7,1062	0,0013553	0,026920	1263,5	2579,9	1273,1	2771,2	3,1319	5,8071
563	7,4255	0,0013658	0,025618	1279,1	2576,7	1289,2	2766,9	3,1598	5,7845
566	7,7557	0,0013766	0,024380	1294,8	2573,2	1305,5	2762,3	3,1878	5,7616
569	8,0970	0,0013879	0,023200	1310,7	2569,4	1321,9	2757,2	3,2160	5,7385
572	8,4496	0,0013996	0,022077	1326,8	2565,3	1338,6	2751,8	3,2443	5,7150
575	8,8140	0,0014118	0,021005	1343,0	2560,9	1355,4	2746,0	3,2727	5,6912
578	9,1903	0,0014246	0,019983	1359,4	2556,1	1372,4	2739,8	3,3014	5,6669
581	9,5789	0,0014379	0,019007	1375,9	2551,0	1389,7	2733,0	3,3302	5,6423
584	9,9800	0,0014519	0,018075	1392,7	2545,5	1407,2	2725,9	3,3592	5,6172
587	10,394	0,0014665	0,017183	1409,7	2539,6	1425,0	2718,2	3,3885	5,5916
590	10,821	0,0014820	0,016329	1426,9	2533,2	1443,0	2709,9	3,4181	5,5654
593	11,262	0,0014982	0,015511	1444,4	2526,4	1461,3	2701,0	3,4479	5,5386
596	11,716	0,0015154	0,014726	1462,2	2519,0	1479,9	2691,6	3,4781	5,5110
Continue dans la prochaine page									

TAB. 7.5 – Propriétés de l'eau à saturation, continuation de la page précédente

T (K)	p ^{sat} (MPa)	τ^{liq}	τ^{vap}	ε^{liq}	ε^{vap}	h ^{liq}	h ^{vap}	s ^{liq}	s ^{vap}
599	12,185	0,0015335	0,013973	1480,3	2511,1	1498,9	2681,4	3,5087	5,4827
602	12,669	0,0015529	0,013249	1498,7	2502,6	1518,3	2670,4	3,5398	5,4536
605	13,167	0,0015735	0,012552	1517,4	2493,4	1538,1	2658,7	3,5713	5,4234
608	13,681	0,0015956	0,011880	1536,6	2483,5	1558,4	2646,0	3,6034	5,3922
611	14,211	0,0016193	0,011232	1556,2	2472,7	1579,2	2632,3	3,6362	5,3597
614	14,757	0,0016451	0,010605	1576,4	2461,0	1600,7	2617,5	3,6697	5,3258
617	15,320	0,0016731	0,0099973	1597,2	2448,3	1622,8	2601,4	3,7041	5,2903
620	15,901	0,0017039	0,0094067	1618,6	2434,3	1645,7	2583,9	3,7396	5,2528
623	16,499	0,0017382	0,0088308	1641,0	2418,9	1669,7	2564,6	3,7765	5,2131
626	17,116	0,0017768	0,0082670	1664,4	2401,9	1694,8	2543,4	3,8150	5,1705
629	17,752	0,0018211	0,0077118	1689,1	2382,7	1721,5	2519,6	3,8556	5,1246
632	18,409	0,0018729	0,0071607	1715,6	2361,0	1750,1	2492,8	3,8991	5,0743
635	19,086	0,0019353	0,0066074	1744,3	2335,7	1781,2	2461,8	3,9463	5,0181
638	19,786	0,0020128	0,0060405	1776,1	2305,5	1815,9	2425,0	3,9986	4,9533
641	20,509	0,0021141	0,0054379	1812,5	2267,1	1855,9	2378,6	4,0587	4,8742
644	21,259	0,0022689	0,0047395	1859,1	2211,8	1907,4	2312,6	4,1363	4,7655
647	22,038	0,0027984	0,0034903	1967,8	2071,6	2029,4	2148,6	4,3224	4,5065

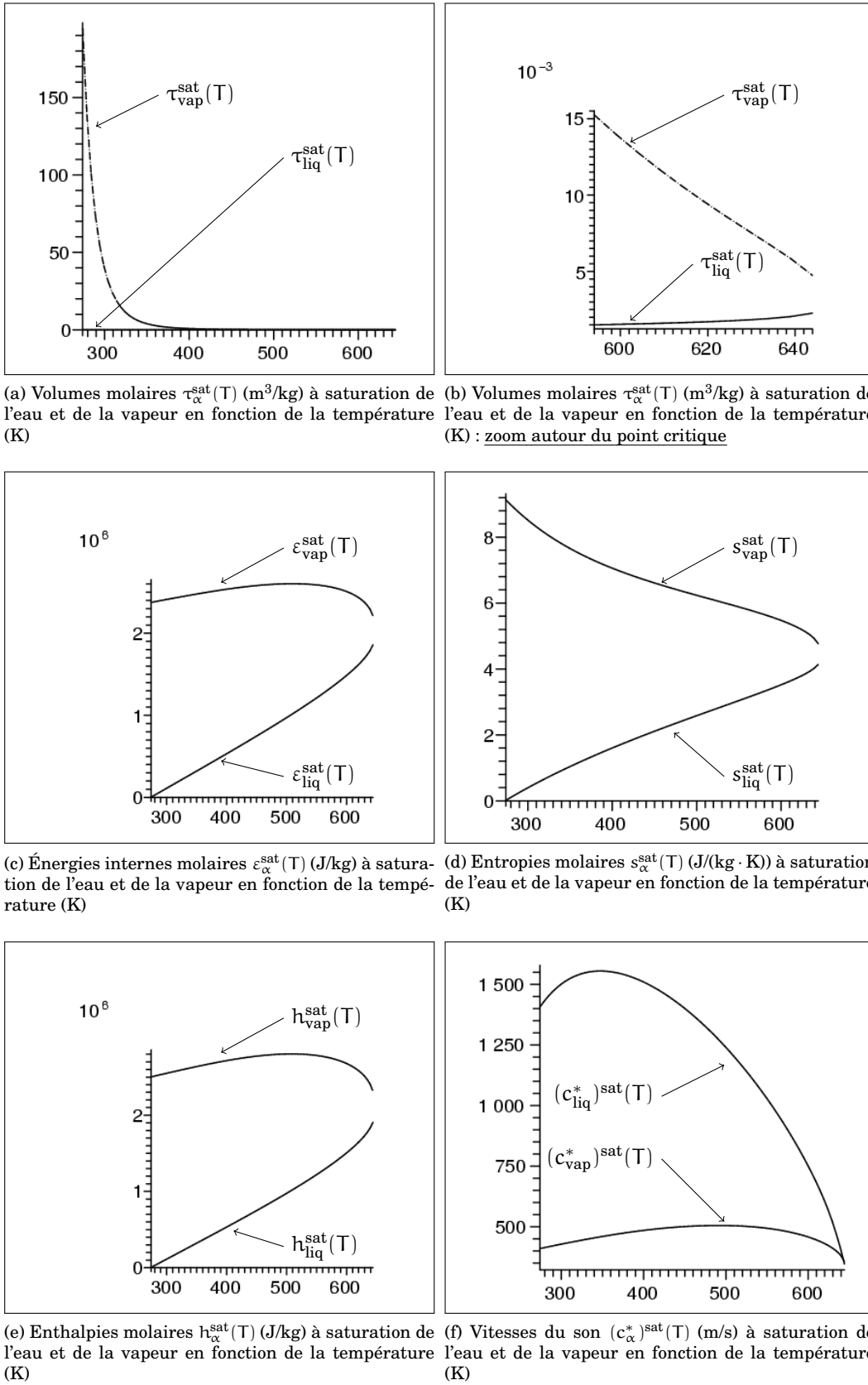


FIG. 7.3.: Propriétés de l'eau à saturation

TAB. 7.6.: Propriétés du dodécane à saturation (source Lemmon *et al.* [69]).

T (K)	p ^{sat} (MPa)	Volume (m ³ /kg)		Énergie interne (kJ/kg)		Enthalpie (kJ/kg)		Entropie (kJ/(kg · K))	
		τ ^{liq}	τ ^{vap}	ε ^{liq}	ε ^{vap}	h ^{liq}	h ^{vap}	s ^{liq}	s ^{vap}
264	6,5503e−07	0,0012967	19673,	−566,50	−566,50	−1,5236	−197,37	−184,48	−0,076539
267	9,1320e−07	0,0013006	14272,	−560,14	−560,14	−1,4996	−193,04	−180,01	−0,075902
270	1,2617e−06	0,0013044	10445,	−553,77	−553,77	−1,4759	−188,67	−175,49	−0,074874
273	1,7283e−06	0,0013082	7710,3	−547,37	−547,37	−1,4523	−184,27	−170,94	−0,073468
276	2,3477e−06	0,0013121	5738,4	−540,95	−540,95	−1,4289	−179,82	−166,35	−0,071699
279	3,1636e−06	0,0013160	4304,8	−534,50	−534,50	−1,4057	−175,34	−161,72	−0,069577
282	4,2300e−06	0,0013199	3254,1	−528,02	−528,02	−1,3826	−170,82	−157,06	−0,067117
285	5,6137e−06	0,0013238	2478,1	−521,52	−521,52	−1,3597	−166,26	−152,35	−0,064328
288	7,3963e−06	0,0013277	1900,6	−514,99	−514,99	−1,3369	−161,66	−147,60	−0,061223
291	9,6771e−06	0,0013316	1467,8	−508,44	−508,44	−1,3142	−157,02	−142,82	−0,057812
294	1,2576e−05	0,0013356	1141,0	−501,86	−501,86	−1,2917	−152,34	−137,99	−0,054105
297	1,6237e−05	0,0013396	892,76	−495,24	−495,24	−1,2694	−147,62	−133,13	−0,050113
300	2,0833e−05	0,0013436	702,85	−488,60	−488,60	−1,2471	−142,86	−128,22	−0,045844
303	2,6566e−05	0,0013476	556,66	−481,93	−481,93	−1,2250	−138,07	−123,28	−0,041308
306	3,3678e−05	0,0013516	443,45	−475,23	−475,23	−1,2030	−133,23	−118,29	−0,036513
309	4,2451e−05	0,0013557	355,25	−468,50	−468,50	−1,1811	−128,35	−113,27	−0,031469
312	5,3213e−05	0,0013598	286,14	−461,74	−461,74	−1,1593	−123,43	−108,20	−0,026183
315	6,6349e−05	0,0013639	231,68	−454,95	−454,95	−1,1377	−118,47	−103,10	−0,020663
318	8,2299e−05	0,0013680	188,55	−448,13	−448,13	−1,1161	−113,47	−97,949	−0,014917
321	0,00010157	0,0013722	154,21	−441,28	−441,28	−1,0947	−108,43	−92,763	−0,0089518
Continue dans la prochaine page									

TAB. 7.6 – Propriétés du dodécane à saturation, continuation de la page précédente

T (K)	p ^{sat} (MPa)	τ^{liq}	τ^{vap}	ε^{liq}	ε^{vap}	h ^{liq}	h ^{vap}	s ^{liq}	s ^{vap}
324	0,00012475	0,0013764	126,72	−434,39	−434,39	−1,0733	−103,34	−87,537	−0,0027749
327	0,00015250	0,0013806	104,62	−427,47	−427,47	−1,0521	−98,224	−82,270	0,0036068
330	0,00018556	0,0013848	86,756	−420,52	−420,52	−1,0309	−93,062	−76,963	0,010187
333	0,00022480	0,0013891	72,257	−413,54	−413,54	−1,0098	−87,860	−71,617	0,016959
336	0,00027116	0,0013934	60,436	−406,52	−406,52	−0,98885	−82,618	−66,230	0,023916
339	0,00032572	0,0013977	50,755	−399,47	−399,47	−0,96796	−77,336	−60,804	0,031053
342	0,00038969	0,0014021	42,793	−392,39	−392,39	−0,94716	−72,013	−55,337	0,038364
345	0,00046438	0,0014065	36,220	−385,27	−385,27	−0,92644	−66,651	−49,832	0,045843
348	0,00055127	0,0014109	30,770	−378,12	−378,12	−0,90580	−61,249	−44,286	0,053484
351	0,00065201	0,0014154	26,235	−370,93	−370,93	−0,88524	−55,808	−38,702	0,061282
354	0,00076838	0,0014199	22,447	−363,71	−363,71	−0,86476	−50,326	−33,079	0,069233
357	0,00090237	0,0014244	19,271	−356,46	−356,46	−0,84435	−44,806	−27,416	0,077330
360	0,0010561	0,0014290	16,599	−349,17	−349,17	−0,82402	−39,246	−21,715	0,085570
363	0,0012320	0,0014336	14,344	−341,84	−341,84	−0,80376	−33,648	−15,976	0,093946
366	0,0014325	0,0014383	12,434	−334,49	−334,48	−0,78357	−28,010	−10,199	0,10246
369	0,0016606	0,0014430	10,810	−327,09	−327,09	−0,76345	−22,334	−4,383	0,11109
372	0,0019190	0,0014477	9,4266	−319,66	−319,66	−0,74340	−16,620	1,469	0,11985
375	0,0022112	0,0014525	8,2433	−312,20	−312,19	−0,72341	−10,868	7,360	0,12873
378	0,0025406	0,0014573	7,2286	−304,70	−304,69	−0,70349	−5,077	13,288	0,13773
381	0,0029109	0,0014622	6,3558	−297,16	−297,16	−0,68363	0,750	19,252	0,14684
384	0,0033261	0,0014671	5,6030	−289,59	−289,58	−0,66383	6,616	25,253	0,15605
387	0,0037906	0,0014720	4,9519	−281,98	−281,98	−0,64410	12,519	31,289	0,16537
Continue dans la prochaine page									

TAB. 7.6 – Propriétés du dodécane à saturation, continuation de la page précédente

T (K)	p ^{sat} (MPa)	τ^{liq}	τ^{vap}	ε^{liq}	ε^{vap}	h ^{liq}	h ^{vap}	s ^{liq}	s ^{vap}
390	0,0043088	0,0014770	4,3872	−274,34	−274,33	−0,62443	18,458	37,362	0,17479
393	0,0048856	0,0014821	3,8962	−266,66	−266,65	−0,60481	24,434	43,469	0,18430
396	0,0055262	0,0014872	3,4682	−258,94	−258,93	−0,58525	30,446	49,612	0,19391
399	0,0062360	0,0014924	3,0942	−251,19	−251,18	−0,56575	36,494	55,790	0,20360
402	0,0070208	0,0014976	2,7666	−243,40	−243,39	−0,54630	42,578	62,002	0,21338
405	0,0078866	0,0015029	2,4789	−235,58	−235,57	−0,52691	48,697	68,247	0,22324
408	0,0088398	0,0015082	2,2257	−227,72	−227,70	−0,50758	54,851	74,526	0,23319
411	0,0098871	0,0015136	2,0025	−219,82	−219,81	−0,48829	61,040	80,838	0,24320
414	0,011036	0,0015191	1,8051	−211,89	−211,87	−0,46906	67,263	87,183	0,25329
417	0,012293	0,0015246	1,6303	−203,92	−203,90	−0,44988	73,520	93,560	0,26345
420	0,013666	0,0015302	1,4751	−195,91	−195,89	−0,43074	79,811	99,969	0,27368
423	0,015164	0,0015358	1,3370	−187,87	−187,84	−0,41166	86,135	106,41	0,28397
426	0,016794	0,0015416	1,2140	−179,79	−179,76	−0,39263	92,491	112,88	0,29432
429	0,018566	0,0015474	1,1042	−171,67	−171,64	−0,37364	98,881	119,38	0,30474
432	0,020489	0,0015532	1,0060	−163,52	−163,49	−0,35470	105,30	125,91	0,31520
435	0,022571	0,0015592	0,91791	−155,33	−155,29	−0,33581	111,76	132,47	0,32572
438	0,024823	0,0015652	0,83886	−147,10	−147,06	−0,31696	118,24	139,06	0,33629
441	0,027256	0,0015713	0,76777	−138,84	−138,79	−0,29816	124,76	145,68	0,34691
444	0,029878	0,0015775	0,70373	−130,54	−130,49	−0,27940	131,30	152,33	0,35758
447	0,032702	0,0015838	0,64595	−122,20	−122,15	−0,26068	137,88	159	0,36828
450	0,035739	0,0015901	0,59372	−113,82	−113,77	−0,24201	144,48	165,70	0,37903
453	0,038999	0,0015966	0,54645	−105,41	−105,35	−0,22338	151,12	172,43	0,38982
Continue dans la prochaine page									

TAB. 7.6 – Propriétés du dodécane à saturation, continuation de la page précédente

T (K)	p ^{sat} (MPa)	τ^{liq}	τ^{vap}	ε^{liq}	ε^{vap}	h ^{liq}	h ^{vap}	s ^{liq}	s ^{vap}
456	0,042496	0,0016031	0,50358	−96,964	−96,896	−0,20479	157,78	179,18	0,40065
459	0,046240	0,0016098	0,46467	−88,479	−88,404	−0,18624	164,48	185,96	0,41151
462	0,050245	0,0016165	0,42928	−79,956	−79,875	−0,16773	171,20	192,77	0,42240
465	0,054524	0,0016234	0,39705	−71,397	−71,308	−0,14927	177,94	199,59	0,43332
468	0,059089	0,0016303	0,36767	−62,800	−62,704	−0,13084	184,72	206,44	0,44427
471	0,063955	0,0016374	0,34084	−54,166	−54,061	−0,11245	191,52	213,32	0,45524
474	0,069136	0,0016446	0,31630	−45,495	−45,381	−0,094095	198,35	220,22	0,46624
477	0,074645	0,0016519	0,29384	−36,787	−36,663	−0,075779	205,20	227,14	0,47726
480	0,080497	0,0016593	0,27325	−28,041	−27,907	−0,057501	212,08	234,08	0,48830
483	0,086708	0,0016668	0,25435	−19,258	−19,113	−0,039259	218,99	241,04	0,49936
486	0,093292	0,0016745	0,23698	−10,438	−10,281	−0,021052	225,91	248,02	0,51044
489	0,10026	0,0016823	0,22100	−1,579	−1,410	−0,002880	232,86	255,02	0,52152
492	0,10764	0,0016903	0,20628	7,315	7,497	0,015257	239,84	262,04	0,53263
495	0,11544	0,0016984	0,19271	16,249	16,445	0,033360	246,84	269,08	0,54374
498	0,12368	0,0017067	0,18018	25,219	25,431	0,051430	253,85	276,14	0,55486
501	0,13237	0,0017151	0,16860	34,228	34,455	0,069467	260,89	283,21	0,56599
504	0,14154	0,0017237	0,15788	43,274	43,518	0,087472	267,96	290,30	0,57712
507	0,15119	0,0017325	0,14796	52,358	52,620	0,10544	275,04	297,41	0,58826
510	0,16136	0,0017414	0,13875	61,481	61,762	0,12339	282,14	304,53	0,59940
513	0,17204	0,0017505	0,13021	70,641	70,942	0,14130	289,26	311,66	0,61053
516	0,18328	0,0017599	0,12228	79,840	80,162	0,15918	296,39	318,81	0,62167
519	0,19508	0,0017694	0,11490	89,077	89,422	0,17703	303,55	325,97	0,63280
Continue dans la prochaine page									

TAB. 7.6 – Propriétés du dodécane à saturation, continuation de la page précédente

T (K)	p ^{sat} (MPa)	τ^{liq}	τ^{vap}	ε^{liq}	ε^{vap}	h ^{liq}	h ^{vap}	s ^{liq}	s ^{vap}
522	0,20746	0,0017791	0,10804	98,352	98,721	0,19486	310,72	333,14	0,64393
525	0,22044	0,0017891	0,10164	107,67	108,06	0,21266	317,91	340,32	0,65505
528	0,23405	0,0017993	0,095677	117,02	117,44	0,23042	325,11	347,51	0,66616
531	0,24829	0,0018097	0,090111	126,41	126,86	0,24817	332,33	354,71	0,67725
534	0,26321	0,0018204	0,084912	135,84	136,32	0,26588	339,56	361,91	0,68834
537	0,27881	0,0018314	0,080051	145,32	145,83	0,28358	346,81	369,13	0,69941
540	0,29511	0,0018426	0,075502	154,83	155,37	0,30124	354,07	376,35	0,71046
543	0,31215	0,0018542	0,071243	164,38	164,96	0,31889	361,33	383,57	0,72149
546	0,32993	0,0018660	0,067251	173,97	174,58	0,33651	368,61	390,80	0,73251
549	0,34849	0,0018782	0,063507	183,60	184,25	0,35411	375,90	398,03	0,74350
552	0,36785	0,0018907	0,059992	193,27	193,97	0,37169	383,19	405,26	0,75446
555	0,38803	0,0019036	0,056689	202,99	203,73	0,38925	390,49	412,49	0,76540
558	0,40905	0,0019169	0,053585	212,74	213,53	0,40679	397,80	419,71	0,77630
561	0,43095	0,0019305	0,050664	222,54	223,37	0,42431	405,11	426,94	0,78717
564	0,45374	0,0019447	0,047913	232,38	233,26	0,44182	412,42	434,16	0,79801
567	0,47745	0,0019592	0,045321	242,27	243,20	0,45931	419,73	441,37	0,80881
570	0,50211	0,0019743	0,042877	252,19	253,19	0,47679	427,04	448,57	0,81957
573	0,52774	0,0019899	0,040570	262,17	263,22	0,49425	434,35	455,77	0,83028
576	0,55438	0,0020060	0,038392	272,18	273,30	0,51170	441,66	462,94	0,84095
579	0,58204	0,0020227	0,036333	282,25	283,42	0,52914	448,96	470,11	0,85157
582	0,61077	0,0020401	0,034386	292,36	293,60	0,54658	456,25	477,26	0,86213
585	0,64059	0,0020581	0,032543	302,51	303,83	0,56400	463,54	484,38	0,87264
Continue dans la prochaine page									

TAB. 7.6 – Propriétés du dodécane à saturation, continuation de la page précédente

T (K)	p ^{sat} (MPa)	τ ^{liq}	τ ^{vap}	ε ^{liq}	ε ^{vap}	h ^{liq}	h ^{vap}	s ^{liq}	s ^{vap}
588	0,67152	0,0020769	0,030798	312,72	314,12	0,58143	470,81	491,49	0,88308
591	0,70362	0,0020965	0,029143	322,98	324,45	0,59885	478,06	498,56	0,89345
594	0,73689	0,0021170	0,027573	333,28	334,84	0,61627	485,29	505,61	0,90375
597	0,77139	0,0021383	0,026083	343,64	345,29	0,63369	492,50	512,62	0,91398
600	0,80714	0,0021607	0,024667	354,06	355,80	0,65112	499,69	519,60	0,92412
603	0,84418	0,0021842	0,023320	364,53	366,37	0,66856	506,84	526,53	0,93416
606	0,88255	0,0022090	0,022038	375,06	377,01	0,68601	513,96	533,41	0,94411
609	0,92229	0,0022351	0,020817	385,64	387,71	0,70348	521,04	540,24	0,95395
612	0,96344	0,0022626	0,019653	396,30	398,48	0,72097	528,08	547,01	0,96367
615	1,0060	0,0022919	0,018541	407,02	409,32	0,73849	535,06	553,71	0,97327
618	1,0501	0,0023230	0,017478	417,81	420,24	0,75604	541,97	560,33	0,98271
621	1,0958	0,0023563	0,016461	428,67	431,25	0,77364	548,82	566,86	0,99200
624	1,1431	0,0023920	0,015486	439,62	442,35	0,79129	555,58	573,28	1,0011
627	1,1920	0,0024305	0,014550	450,65	453,55	0,80900	562,24	579,58	1,0100
630	1,2426	0,0024722	0,013649	461,79	464,86	0,82680	568,79	585,75	1,0187
633	1,2950	0,0025179	0,012780	473,03	476,29	0,84470	575,20	591,75	1,0271
636	1,3493	0,0025684	0,011939	484,40	487,87	0,86273	581,45	597,55	1,0352
639	1,4055	0,0026248	0,011121	495,93	499,62	0,88092	587,49	603,12	1,0429
642	1,4637	0,0026888	0,010320	507,63	511,57	0,89934	593,27	608,37	1,0501
645	1,5240	0,0027631	0,0095307	519,57	523,79	0,91807	598,70	613,23	1,0567
648	1,5867	0,0028522	0,0087400	531,84	536,37	0,93726	603,66	617,52	1,0625
651	1,6517	0,0029652	0,0079279	544,61	549,50	0,95720	607,88	620,97	1,0670
Continue dans la prochaine page									

TAB. 7.6 – Propriétés du dodécane à saturation, continuation de la page précédente

T (K)	p ^{sat} (MPa)	τ ^{liq}	τ ^{vap}	ε ^{liq}	ε ^{vap}	h ^{liq}	h ^{vap}	s ^{liq}	s ^{vap}
654	1,7195	0,0031242	0,0070465	558,29	563,66	0,97858	610,74	622,86	1,0691
657	1,7904	0,0034338	0,0058901	574,80	580,95	1,0046	609,62	620,17	1,0643

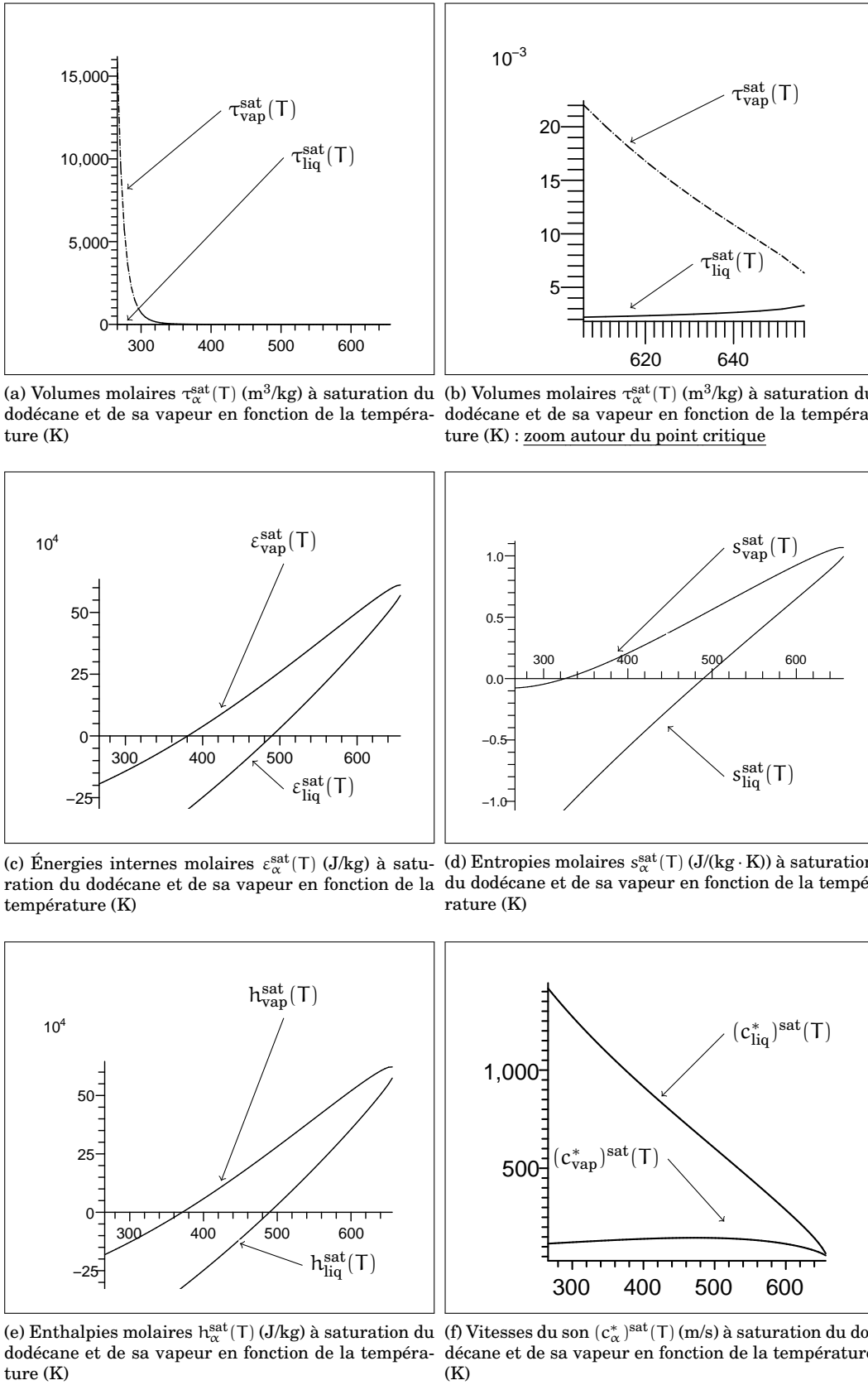


FIG. 7.4.: Propriétés du dodécane à saturation

DEUXIÈME PARTIE .

APPROXIMATION NUMÉRIQUE

*D*ANS CETTE PARTIE on présente une classe de méthodes numériques pour simuler le problème de changement de phase. Tout d'abord, au chapitre 8 on considère le système d'Euler avec changement de phase en négligeant les effets thermiques et dissipatifs ainsi que la tension de surface. Pour simuler ce système on adopte une approche de type relaxation. Le système des équations d'Euler peut alors être obtenu comme limite d'un système augmenté contenant des termes sources de relaxation : lorsque les temps caractéristiques de la transition de phase tendent vers zéro, le système augmenté tend vers l'équilibre thermodynamique modélisant ainsi le phénomène du changement de phase. Le schéma numérique sera ainsi basé sur le système augmenté. Au chapitre 9 on introduit (dans le système augmenté ainsi que dans le système d'Euler avec changement de phase) les effets dissipatifs tels la gravité, la diffusion de la chaleur et la tension de surface et on décrit le schéma numérique utilisé. Cette implementation utilise un modèle à cinq équations avec fermeture isotherme. On présente enfin au chapitre 10 quelques résultats de simulations numériques.

CHAPITRE 8

Approche par relaxation instantanée

8.1 Construction du sur-système HRM.	227
8.1.1 Hypothèses générales de modélisation	228
8.1.2 Minimisation de l'action hamiltonienne	228
8.1.3 Choix d'une énergie interne	237
8.1.4 Structure dissipative	238
8.1.5 Nature et propriétés du système HRM à six équations	240
8.2 Dérivation d'autres sur-systèmes	244
8.2.1 Nature et propriétés du système à cinq équations avec fermeture isotherme	246
8.3 Couple HRM/HEM retenu	250
8.4 Schémas numériques basés sur le système HRM	251
8.5 Conclusion.	252

Résumé

DANS LA PARTIE PRÉCÉDENTE, dans le cadre des transitions de phase liquide-vapeur, on a établi les équations vérifiées par l'écoulement. Dans ce chapitre nous allons décrire une approche de type relaxation qui permettra d'écrire au chapitre 9 un schéma numérique. Le cœur des approches de relaxation est la construction d'un sur-système (c'est à dire un système avec plus d'équations et plus d'inconnues) qui contient des termes sources avec des coefficients de relaxation. Ce système doit être tel que, lorsque ces paramètres de relaxation tendent vers zéro, on retrouve au moins formellement le système du départ.

Comme dans Caro et al. (22; 24), Gavriluk et Gouin (38), Gavriluk et Saurel (39), on déduit les équations de ce système par minimisation

de l'action hamiltonienne et, en imposant la positivité de la production d'entropie, on obtient un système compatible avec le second principe de la thermodynamique et qui dégénère vers le système d'Euler à l'équilibre.

Nous allons maintenant nous intéresser à la résolution numérique du système des équations d'Euler avec changement de phase que l'on rappelle ci-dessous :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P^{\text{eq}} \mathbf{I}) = 0 \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P^{\text{eq}}) \mathbf{u}) = 0 \end{cases}$$

$$P^{\text{eq}}(\rho = 1/\tau, \varepsilon) = \frac{s_\tau^{\text{eq}}}{s_\varepsilon^{\text{eq}}}, \quad e \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} + \varepsilon$$

Dans le développement d'un schéma numérique dédié à la résolution de ce système, nous sommes confrontés à deux principales difficultés. Tout d'abord, la pression P^{eq} est continue mais sa dérivée discontinue, ce qui pourrait engendrer des oscillations lorsque on passe d'une phase pure à la zone de mélange à l'équilibre. Deuxièmement, en toute généralité on peut seulement garantir qu'un schéma est entropique et donc qu'il approche une solution de Lax, mais on ne peut pas assurer que cette solution est aussi une solution de Liu (à cause de la non-unicité des solution entropiques dont on a parlé au chapitre 4). De plus, dans les écoulements considérés coexistent des zones liquides (et donc presque incompressibles) et des zones gazeuses (fortement compressibles) : le nombre de Mach est ainsi fortement variable.

Les schémas proposés devront donc répondre en premier lieu à l'impératif de capturer la solution de Liu tout en gardant ses propriétés de stabilité et de convergence dans une large gamme de nombres de Mach. En second lieu, ils devront garder certaines inconnues dans leurs bornes physiques (ici essentiellement les fractions de masse, de volume et d'énergie).

Dans un premier temps, nous nous intéressons au premier problème, à savoir trouver une méthode numérique qui permettrait de capturer l'unique solution de Liu. Pour cela plusieurs approches sont possibles, notamment

- ☛ on peut construire un solveur de Riemann exact suivant les travaux de Voß [96] pour une loi d'état de type Van der Waals : cette idée, très utile pour comparer les solutions obtenues avec un schéma quelconque avec la solution de Liu, est toutefois inutilisable dans un contexte industriel à cause des temps de calcul trop élevés ;
- ☛ une autre idée est basée sur le principe que la solution de Liu est l'unique solution qui admet un profil de viscosité et donc on peut construire un solveur avec une viscosité évanescence de la même manière que Jaouen [58] pour des lois d'état de type gaz parfait simplifiés ;
- ☛ enfin, une stratégie très «flexible» consiste à utiliser un (des) solveur(s) basé(s) sur une approche par relaxation (qui est une extension de la notion de schéma de

relaxation introduite initialement par Chen *et al.* [26], Coquel et Perthame [27]) de la même façon que Barberon [9], Caro *et al.* [24], Dellacherie [30], Guillemaud [45], Helluy [46], Helluy et Barberon [47], Helluy et Seguin [48], Saurel et Abgrall [88], cette dernière approche permettant une grande adaptation de modèles et de schémas déjà existants.

L'approche que nous avons retenue dans cette thèse pour résoudre numériquement le système d'Euler avec changement de phase est celle de relaxation. Dans ce chapitre nous étudierons le système relaxé au niveau continu tandis que la résolution numérique proprement dite, ainsi que la prise en compte d'autres phénomènes physiques tels la gravité, la capillarité et la diffusion de la chaleur, sera traitée au prochaine chapitre.

Idée de base

De façon très succincte, l'idée générale de la relaxation est la suivante : on considère un système (Sys) qui admet un état d'équilibre (Eq) et l'on veut forcer (Sys) à évoluer vers cet équilibre (Eq). Pour cela, on ajoute des termes de relaxation dans les équations qui régissent (Sys) de façon à forcer la convergence des variables du système vers l'état d'équilibre (Eq). Formellement, si on écrit le système (Eq) sous la forme

$$\partial_t \mathbf{U} + \operatorname{div} \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{K}(\mathbf{U}) \quad \text{avec } \mathbf{U} \in \mathbb{R}^m, \quad (8.1)$$

il s'agit de trouver un sur-système (Sys) de la forme

$$\partial_t \mathbf{V} + \operatorname{div} \mathbf{G}(\mathbf{V}) = \mathbf{S}(\mathbf{V}) + \frac{1}{\mu} \mathbf{R}(\mathbf{V}) \quad \text{avec } \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{m'}, \quad m' > m \quad (8.2)$$

tel que, lorsque le(s) paramètre(s) de relaxation μ tend(ent) vers zéro, la solution du système (8.2) tend (au moins formellement) vers la solution du système d'équations de départ (8.1). Traditionnellement dans le cadre des transitions de phase, si le système (8.1) est le système d'Euler avec la loi de changement de phase, on parle de système HEM pour *homogeneous equilibrium model* et le système (8.2) est alors noté HRM pour *homogeneous relaxation model*.

Dans le cas qui nous concerne on verra que le système (8.2) que l'on considère est un système à six équations et l'état d'équilibre vers lequel on souhaite faire converger ce système est le système des équations d'Euler avec la loi de changement de phase. Pour ce faire on introduira dans le système HRM des termes de relaxation en température, en pression et en potentiel de Gibbs.

8.1. Construction du sur-système : modèle à une vitesse et deux fluides

Pour obtenir le système (8.2) on se base sur le principe de moindre action. L'approche variationnelle permettant la construction de modèles diphasiques a été utilisée par nombreux auteurs, comme Gavriluk et Gouin [38], Gavriluk et Saurel [39] ou encore

Caro *et al.* [22; 24] pour un modèle diphasique sans énergie. Dans le but d'obtenir les équations de mouvement par ce principe variationnel, nous négligerons dans un premier temps les effets dissipatifs. Une fois le système établi, on choisira d'abord une forme particulière de l'énergie interne du système et, pour être en accord avec le second principe de la thermodynamique, on imposera que la production d'entropie est positive. Cette inégalité nous donnera alors les termes sources de changement de phase.

8.1.1. Hypothèses générales de modélisation

Pour commencer on suppose qu'il existe une entropie (physique) s pour le système diphasique et que l'énergie interne du système ε dépend seulement des variables (ρ, s, y, z, ψ)

$$(\rho, s, y, z, \psi) \mapsto \varepsilon,$$

où on rappelle que $\rho = z\rho_1 + (1 - z)\rho_2$ est la densité de mélange, $y = z\frac{\rho_1}{\rho}$ désigne la concentration de la phase 1 et $\psi = z\frac{\rho_1 \varepsilon_1}{\rho \varepsilon}$ la fraction d'énergie de la phase 1.

Les deux phases sont supposées avoir la même vitesse \mathbf{u} et on note $\mathbf{j} \stackrel{\text{def}}{=} \rho \mathbf{u}$ la quantité de mouvement globale du fluide.

On définit le lagrangien \mathcal{L} du système de manière classique comme la différence entre l'énergie cinétique et l'énergie interne

$$\mathcal{L}(\rho, \mathbf{j}, s, y, z, \psi) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 - \rho \varepsilon = \frac{|\mathbf{j}|^2}{2\rho} - \rho \varepsilon. \quad (8.3)$$

Enfin on suppose que la densité globale vérifie l'équation de continuité

$$\partial_t \rho + \text{div}(\mathbf{j}) = 0$$

et, comme le principe de moindre action ne rend pas compte des effets dissipatifs, on impose que la production d'entropie est nulle

$$\partial_t(\rho s) + \text{div}(\mathbf{j}s) = 0.$$

8.1.2. Minimisation de l'action hamiltonienne

Considérons une transformation entre deux instants t_1 et t_2 ($t_1 < t_2$) d'un volume de fluide qui à l'instant initial occupe un volume représenté par un ouvert $\Omega(0)$ de \mathbb{R}^d ($d = 1, 2, 3$).

Du point de vue eulérien, en accord avec les hypothèses sur les variables d'état, la transformation qui envoie ce volume de fluide est connue lorsqu'on connaît les six fonctions

$$(\mathbf{x}, t) \mapsto \rho,$$

$$(\mathbf{x}, t) \mapsto \mathbf{j},$$

$$(\mathbf{x}, t) \mapsto s,$$

$$\begin{aligned}(\mathbf{x}, t) &\mapsto y, \\(\mathbf{x}, t) &\mapsto z, \\(\mathbf{x}, t) &\mapsto \psi,\end{aligned}$$

où \mathbf{x} dénote la variable eulérienne d'espace.

Du point de vue lagrangien, si \mathbf{X} désigne la coordonnée matérielle lagrangienne, la transformation qui agit sur $\Omega(0)$ est connue lorsqu'on connaît les cinq fonctions

$$\begin{aligned}(\mathbf{X}, t) &\mapsto \mathbf{x} = \chi, \\(\mathbf{X}, t) &\mapsto s, \\(\mathbf{X}, t) &\mapsto y, \\(\mathbf{X}, t) &\mapsto z, \\(\mathbf{X}, t) &\mapsto \psi,\end{aligned}$$

où χ est un difféomorphisme de classe \mathcal{C}^1 . La vitesse $(\mathbf{X}, t) \mapsto \mathbf{u}$ est définie par

$$\mathbf{u}(\chi(\mathbf{X}, t), t) \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial \chi}{\partial t} \right|_{\mathbf{x}},$$

ainsi l'application

$$(\mathbf{X}, t) \mapsto \chi$$

décrit les trajectoires des particules du fluide, tandis que les applications

$$\begin{aligned}(\mathbf{X}, t) &\mapsto y \\(\mathbf{X}, t) &\mapsto z \\(\mathbf{X}, t) &\mapsto \psi\end{aligned}$$

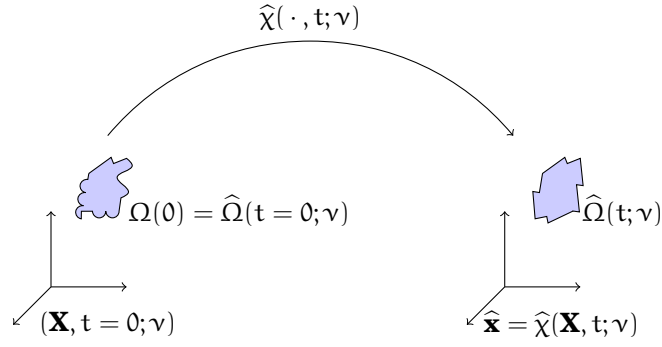
sont trois champs associés aux particules du fluide.

Considérons maintenant une famille de transformations, paramétrées par un petit coefficient ν , exprimées en forme lagrangienne

$$\begin{aligned}(\mathbf{X}, t; \nu) &\mapsto \hat{\mathbf{x}} = \hat{\chi}, \\(\mathbf{X}, t; \nu) &\mapsto \hat{s}, \\(\mathbf{X}, t; \nu) &\mapsto \hat{y}, \\(\mathbf{X}, t; \nu) &\mapsto \hat{z}, \\(\mathbf{X}, t; \nu) &\mapsto \hat{\psi}.\end{aligned}$$

Par ailleurs, considérons la même famille de transformations exprimées cette fois-ci en forme eulérienne :

$$\begin{aligned}(\hat{\mathbf{x}}, t; \nu) &\mapsto \hat{\rho}, \\(\hat{\mathbf{x}}, t; \nu) &\mapsto \hat{\mathbf{j}},\end{aligned}$$


 FIG. 8.1.: Le coefficient ν paramétrise la famille de transformations $\hat{\chi}$

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{x}}, t; \nu) &\mapsto \hat{s}, \\ (\hat{\mathbf{x}}, t; \nu) &\mapsto \hat{y}, \\ (\hat{\mathbf{x}}, t; \nu) &\mapsto \hat{z}, \\ (\hat{\mathbf{x}}, t; \nu) &\mapsto \hat{\psi}. \end{aligned}$$

On note $\hat{\Omega}(t; \nu)$ l'image de $\Omega(0)$ par $\hat{\chi}(\cdot, t; \nu)$ (cf. figure 8.1), autrement dit

$$\hat{\Omega}(t; \nu) \stackrel{\text{def}}{=} \{\hat{\chi}(\mathbf{X}, t; \nu) \text{ tels que } \mathbf{X} \in \Omega(0)\}.$$

Supposons classiquement que

- ① $\hat{\chi}$ est un difféomorphisme de classe \mathcal{C}^1 et la vitesse $\hat{\mathbf{u}}$ est définie par

$$\hat{\mathbf{u}}(\hat{\chi}(\mathbf{X}, t; \nu), t; \nu) \stackrel{\text{def}}{=} \left. \frac{\partial \hat{\chi}}{\partial t} \right|_{\mathbf{X}, \nu}; \quad (8.4)$$

- ② pour toute valeur de ν donnée, la densité

$$(\hat{\mathbf{x}}, t) \mapsto \hat{\rho}(\hat{\mathbf{x}}, t; \nu)$$

vérifie la conservation de la masse, autrement dit pour tout ouvert $\Omega(0)$

$$\int_{\Omega(0)} \rho(\mathbf{X}, 0) d\mathbf{X} = \int_{\hat{\Omega}(t; \nu)} \hat{\rho}(\hat{\mathbf{x}}, t; \nu) d\hat{\mathbf{x}} \quad \forall t \in]t_1, t_2[;$$

- ③ pour toute valeur de ν donnée et pour tout ouvert $\Omega(0)$, la production de l'entropie

$$(\hat{\mathbf{x}}, t) \mapsto \hat{s}(\hat{\mathbf{x}}, t; \nu)$$

est nulle

$$\int_{\Omega(0)} (\rho s)(\mathbf{X}, 0) d\mathbf{X} = \int_{\hat{\Omega}(t; \nu)} \hat{\rho} \hat{s}(\hat{\mathbf{x}}, t; \nu) d\hat{\mathbf{x}} \quad \forall t \in]t_1, t_2[;$$

④ pour tout $\mathbf{X} \in \Omega(0)$ et pour tout $t \in]t_1, t_2[$

$$\begin{aligned}\widehat{\chi}(\mathbf{X}, t; \nu = 0) &= \chi(\mathbf{X}, t), \\ \widehat{s}(\mathbf{X}, t; \nu = 0) &= s(\mathbf{X}, t), \\ \widehat{y}(\mathbf{X}, t; \nu = 0) &= y(\mathbf{X}, t), \\ \widehat{z}(\mathbf{X}, t; \nu = 0) &= z(\mathbf{X}, t), \\ \widehat{\psi}(\mathbf{X}, t; \nu = 0) &= \psi(\mathbf{X}, t);\end{aligned}$$

⑤ les trajectoires ne sortent pas du domaine quand ν varie ; autrement dit

$$\widehat{\mathbf{n}} \cdot \frac{\partial \widehat{\mathbf{x}}}{\partial \nu} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} = 0.$$

L'action $\mathcal{A}(\nu)$ associée à $\widehat{\Omega}$ entre les instants t_1 et t_2 s'écrit

$$\mathcal{A}(\nu) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{t_1}^{t_2} \int_{\widehat{\Omega}(t; \nu)} \mathcal{L}(\widehat{\rho}, \widehat{\mathbf{j}}, \widehat{s}, \widehat{y}, \widehat{z}, \widehat{\psi})(\widehat{\mathbf{x}}, t; \nu) d\widehat{\mathbf{x}} dt.$$

Le principe de moindre action affirme que la trajectoire physique, correspondant à $\nu = 0$, est celle qui minimise (ou, plus généralement, optimise) l'action $\mathcal{A}(\nu)$. Pour utiliser ce principe on va alors calculer la dérivée de \mathcal{A} et l'évaluer en zéro :

$$\delta \mathcal{A} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d\mathcal{A}}{d\nu}(\nu = 0).$$

Supposons avoir la régularité suffisante pour qu'il soit possible de passer la dérivation à l'intérieur de l'intégrale ; on obtient

$$\begin{aligned}\frac{d\mathcal{A}}{d\nu} &= \int_{t_1}^{t_2} \int_{\widehat{\Omega}(t; \nu)} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{j}} \frac{\partial \widehat{\mathbf{j}}}{\partial \nu} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \frac{\partial \widehat{\rho}}{\partial \nu} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \frac{\partial \widehat{s}}{\partial \nu} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} \right] d\widehat{\mathbf{x}} dt + \\ &\quad + \int_{t_1}^{t_2} \int_{\widehat{\Omega}(t; \nu)} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} \frac{\partial \widehat{y}}{\partial \nu} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} \frac{\partial \widehat{z}}{\partial \nu} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \frac{\partial \widehat{\psi}}{\partial \nu} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} \right] d\widehat{\mathbf{x}} dt + \\ &\quad + \int_{t_1}^{t_2} \int_{\partial \widehat{\Omega}(t; \nu)} \mathcal{L}(\widehat{\rho}, \widehat{\mathbf{j}}, \widehat{s}, \widehat{y}, \widehat{z}, \widehat{\psi}) \widehat{\mathbf{n}} \cdot \frac{\partial \widehat{\mathbf{x}}}{\partial \nu} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} d\widehat{\sigma} dt. \quad (8.5)\end{aligned}$$

Grâce à l'hypothèse ⑤, le terme de bord s'annule pour $\nu = 0$ et seule l'intégrale de volume demeure, ainsi

$$\delta \mathcal{A} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\widehat{\Omega}(t; 0)} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{j}} \delta \mathbf{j} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \delta \rho + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \delta s + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} \delta y + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} \delta z + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta \psi \right] d\mathbf{x} dt, \quad (8.6)$$

où on a défini

$$\delta \rho(\mathbf{x}, t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \widehat{\rho}}{\partial \nu} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t}(\mathbf{x}, t; \nu = 0), \quad \delta \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \widehat{\mathbf{j}}}{\partial \nu} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t}(\mathbf{x}, t; \nu = 0),$$

$$\begin{aligned}\delta s(\mathbf{x}, t) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \widehat{s}}{\partial \nu} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} (\mathbf{x}, t; \nu = 0), & \delta y(\mathbf{x}, t) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \widehat{y}}{\partial \nu} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} (\mathbf{x}, t; \nu = 0), \\ \delta z(\mathbf{x}, t) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \widehat{z}}{\partial \nu} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} (\mathbf{x}, t; \nu = 0), & \delta \psi(\mathbf{x}, t) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \widehat{\psi}}{\partial \nu} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} (\mathbf{x}, t; \nu = 0).\end{aligned}$$

En tenant compte de la définition de \mathcal{L} on voit immédiatement que le moment conjugué $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{j}}$ est simplement \mathbf{u} et donc

$$\delta \mathcal{A} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\widehat{\Omega}(t;0)} \left[\mathbf{u} \delta \mathbf{j} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \delta \rho + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \delta s + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} \delta y + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} \delta z + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta \psi \right] d\mathbf{x} dt. \quad (8.7)$$

Si on note ξ le vecteur déplacement virtuel

$$\xi(\mathbf{X}, t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \widehat{\mathbf{x}}}{\partial \nu} \Big|_{\mathbf{X}, t} (\mathbf{X}, t; \nu = 0),$$

on peut choisir δy , δz et $\delta \psi$ arbitraires alors que $\delta \rho$, $\delta \mathbf{j}$ et δs sont liés par le déplacement virtuel ξ .

Ce choix de famille de transformations implique que les dérivées par rapport au temps physique t et celle par rapport au paramètre ν commutent. Notamment, en utilisant l'hypothèse de conservation de la masse, pour une valeur de ν donnée et pour tout $t \in]t_1, t_2[$ on a

$$\int_{\Omega(0)} \rho(\mathbf{X}, 0) d\mathbf{X} \stackrel{②}{=} \int_{\widehat{\Omega}(t; \nu)} \widehat{\rho}(\widehat{\mathbf{x}}, t; \nu) d\widehat{\mathbf{x}} = \int_{\Omega(0)} \rho(\widehat{\chi}(\mathbf{X}, t; \nu), t; \nu) \left| \frac{\partial \widehat{\chi}}{\partial \mathbf{X}} \right| d\mathbf{X},$$

qui équivaut à écrire, si Ω est quelconque,

$$\rho(\mathbf{X}, 0) = \rho(\widehat{\chi}(\mathbf{X}, t; \nu), t; \nu) \left| \frac{\partial \widehat{\chi}}{\partial \mathbf{X}} \right|.$$

Dans cette relation classique on voit bien que t et ν jouent le même rôle ; on peut donc écrire la conservation de la masse selon la variation de ν comme

$$\frac{\partial \widehat{\rho}}{\partial \nu} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} + \sum_{i=1}^d \frac{\partial}{\partial \widehat{x}_i} \left(\widehat{\rho} \frac{\partial \widehat{x}_i}{\partial \nu} \Big|_{\mathbf{X}, t} \right) = 0.$$

Pour $\nu = 0$ la relation précédente donne immédiatement

$$\boxed{\delta \rho = -\operatorname{div}(\rho \xi),} \quad (8.8)$$

qui, en variables eulériennes, n'est rien d'autre que l'équation de conservation de la masse

$$\boxed{\partial_t \rho + \operatorname{div}(\mathbf{j}) = 0.} \quad (8.9)$$

De même, on peut écrire la conservation de l'entropie selon la variation de v comme

$$\frac{\partial(\widehat{\rho s})}{\partial v} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} + \sum_{i=1}^d \frac{\partial}{\partial \widehat{x}_i} \left(\widehat{\rho s} \frac{\partial \widehat{x}_i}{\partial v} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} \right) = 0.$$

Pour $v = 0$ la relation précédent donne immédiatement

$$\boxed{\delta s = -\boldsymbol{\xi} \cdot \nabla s} \quad (\text{i.e. } \delta(\rho s) = -\operatorname{div}(\boldsymbol{\xi} \rho s)); \quad (8.10)$$

en variables euleriennes on retrouve l'équation de conservation de l'entropie

$$\boxed{\partial_t s + \mathbf{u} \cdot \nabla s = 0} \quad (\text{i.e. } \partial_t(\rho s) + \operatorname{div}(\mathbf{j} s) = 0). \quad (8.11)$$

Regardons maintenant le terme $\delta \mathbf{u}$. Cette fois-ci on utilisera le lien entre la famille de transformations lagrangiennes et eulériennes. En utilisant la définition de la vitesse $\widehat{\mathbf{u}}(\widehat{\mathbf{x}}, t; v) = \widehat{\mathbf{u}}(\chi(\mathbf{X}, t; v), t; v)$, on obtient

$$\frac{\partial \widehat{\mathbf{u}}}{\partial v} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} = \frac{\partial \widehat{\mathbf{u}}}{\partial \widehat{\mathbf{x}}} \Big|_{v, t} \frac{\partial \widehat{\mathbf{x}}}{\partial v} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} + \frac{\partial \widehat{\mathbf{u}}}{\partial v} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t}. \quad (8.12)$$

La définition (8.4) de $\widehat{\mathbf{u}}$ implique aussi que

$$\frac{\partial \widehat{\mathbf{u}}}{\partial v} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} = \frac{\partial}{\partial v} \left(\frac{\partial \chi}{\partial t} \right) = \frac{\partial^2 \chi}{\partial v \partial t},$$

qui, pour $v = 0$, s'écrit

$$\frac{\partial \widehat{\mathbf{u}}}{\partial v} \Big|_{\widehat{\mathbf{x}}, t} (\mathbf{X}, t; v = 0) = \frac{\partial \boldsymbol{\xi}}{\partial t} \Big|_{\mathbf{X}} (\mathbf{X}, t) = \frac{D\boldsymbol{\xi}}{Dt} (\mathbf{x}, t),$$

où $D\star/Dt \stackrel{\text{def}}{=} \partial\star/\partial t + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} \star$ est la dérivée matérielle. En posant $v = 0$ dans (8.12) et en utilisant la dernière relation on obtient finalement

$$\delta \mathbf{u} = \frac{D\boldsymbol{\xi}}{Dt} - \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \boldsymbol{\xi}.$$

Puisque $\delta \mathbf{j} = \rho \delta \mathbf{u} + \mathbf{u} \delta \rho$, de (8.8) on déduit que

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{j} &= \rho(\partial_t \boldsymbol{\xi} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi} \nabla \mathbf{u}) + \mathbf{u}(-\operatorname{div}(\rho \boldsymbol{\xi})) = \\ &= \partial_t(\rho \boldsymbol{\xi}) - \boldsymbol{\xi} \partial_t \rho + \mathbf{j} \cdot \nabla \boldsymbol{\xi} - \rho \boldsymbol{\xi} \nabla \mathbf{u} - \mathbf{u} \operatorname{div}(\rho \boldsymbol{\xi}) = \\ &= \partial_t(\rho \boldsymbol{\xi}) + (\boldsymbol{\xi} \operatorname{div} \mathbf{j} + \mathbf{j} \cdot \nabla \boldsymbol{\xi}) - (\mathbf{u} \operatorname{div}(\rho \boldsymbol{\xi}) + \rho \boldsymbol{\xi} \nabla \mathbf{u}) \end{aligned}$$

qui donne

$$\boxed{\delta \mathbf{j} = \partial_t(\rho \boldsymbol{\xi}) + \operatorname{div}(\boldsymbol{\xi} \otimes \mathbf{j}) - \operatorname{div}(\mathbf{j} \otimes \boldsymbol{\xi})}, \quad (8.13)$$

où, pour tout vecteur $\mathbf{a} = (a_i)_i$ et $\mathbf{b} = (b_i)_i$, le produit $\operatorname{div}(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})$ est défini comme le

vecteur de composantes

$$(\text{div}(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}))_i = \sum_j \frac{\partial(a_i b_j)}{\partial x_j}.$$

Revenons maintenant à la variation de l'action hamiltonienne $\delta\mathcal{A}$. Le terme $\delta\mathcal{A}$ (8.7) se réécrit, grâce aux relations (8.8), (8.10) et (8.13), sous la forme

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{A} = & \int_{t_1}^{t_2} \int_{\widehat{\Omega}(t;0)} \left[\mathbf{u} \partial_t(\rho \boldsymbol{\xi}) + \mathbf{u} \text{div}(\boldsymbol{\xi} \otimes \mathbf{j} - \mathbf{j} \otimes \boldsymbol{\xi}) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \text{div}(\rho \boldsymbol{\xi}) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \boldsymbol{\xi} \nabla s \right] d\mathbf{x} dt + \\ & + \int_{t_1}^{t_2} \int_{\widehat{\Omega}(t;0)} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} \delta y + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} \delta z + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta \psi \right] d\mathbf{x} dt. \end{aligned}$$

L'identité tensorielle

$$\mathbf{u} \text{div}(\boldsymbol{\xi} \otimes \mathbf{j} - \mathbf{j} \otimes \boldsymbol{\xi}) = -[(\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{j}] \cdot \boldsymbol{\xi},$$

permet de réécrire $\delta\mathcal{A}$ comme

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{A} = & \int_{t_1}^{t_2} \int_{\widehat{\Omega}(t;0)} \left[\mathbf{u} \partial_t(\rho \boldsymbol{\xi}) - [(\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{j}] \cdot \boldsymbol{\xi} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \text{div}(\rho \boldsymbol{\xi}) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \boldsymbol{\xi} \nabla s \right] d\mathbf{x} dt + \\ & + \int_{t_1}^{t_2} \int_{\widehat{\Omega}(t;0)} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} \delta y + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} \delta z + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta \psi \right] d\mathbf{x} dt. \end{aligned}$$

Étant donné que le déplacement virtuel $\boldsymbol{\xi}$ s'annule sur le bord de $\widehat{\Omega}(t;0) \times [t_1, t_2]$, en utilisant le théorème de Gauss-Green-Ostrogradsky on obtient

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{A} = & \int_{t_1}^{t_2} \int_{\widehat{\Omega}(t;0)} \left[-\rho \boldsymbol{\xi} \partial_t(\mathbf{u}) - [(\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{j}] \cdot \boldsymbol{\xi} + \rho \nabla \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) \cdot \boldsymbol{\xi} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \boldsymbol{\xi} \nabla s \right] d\mathbf{x} dt + \\ & + \int_{t_1}^{t_2} \int_{\widehat{\Omega}(t;0)} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} \delta y + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} \delta z + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta \psi \right] d\mathbf{x} dt = \\ = & \int_{t_1}^{t_2} \int_{\widehat{\Omega}(t;0)} \left[-\rho \partial_t \mathbf{u} - (\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{j} + \rho \nabla \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \nabla s \right] \cdot \boldsymbol{\xi} d\mathbf{x} dt + \\ & + \int_{t_1}^{t_2} \int_{\widehat{\Omega}(t;0)} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} \delta z + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} \delta y + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \delta \psi \right] d\mathbf{x} dt. \end{aligned}$$

Le principe de moindre action implique que $\delta\mathcal{A} = 0$. Puisque la relation précédente est vraie pour toute valeur de \mathbf{v} , en particulier elle est vraie pour tout $\boldsymbol{\xi}$, δz , δy et $\delta \psi$. En évaluant cette relation en $\mathbf{v} = 0$ on déduit l'équation suivante

$$\rho \partial_t \mathbf{u} + (\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{j} - \rho \nabla \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \nabla s = 0, \quad (8.14a)$$

ainsi que l'annulation des trois impulsions généralisées

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} = 0, \quad (8.14b)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} = 0, \quad (8.14c)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} = 0. \quad (8.14d)$$

Pour trouver l'équation portant sur la quantité de mouvement observons que

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho \mathbf{u}) &= \rho \partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \partial_t \rho = \\ &= -(\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{j} + \rho \nabla \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \nabla s - \mathbf{u} \operatorname{div}(\mathbf{j}) = \\ &= -\rho [(\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{u}] + \rho \nabla \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \nabla s - \mathbf{u} \operatorname{div}(\mathbf{j}) = \\ &= -\rho \left[\operatorname{div}(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \mathbf{u} \cdot \operatorname{div}(\mathbf{u}) - \frac{1}{2} \operatorname{div}(|\mathbf{u}|^2 \operatorname{Id}) \right] + \rho \nabla \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \nabla s - \mathbf{u} \operatorname{div}(\mathbf{j}). \end{aligned}$$

De la relation tensorielle

$$\rho \operatorname{div}(\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \mathbf{j} \cdot \operatorname{div}(\mathbf{u}) = \operatorname{div}(\mathbf{j} \otimes \mathbf{u}) - \mathbf{u} \operatorname{div}(\mathbf{j})$$

on déduit

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho \mathbf{u}) &= \left[\frac{1}{2} \rho \operatorname{div}(|\mathbf{u}|^2 \operatorname{Id}) \right] - \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \rho \nabla \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \nabla s = \\ &= \left[\frac{1}{2} \operatorname{div}(\rho |\mathbf{u}|^2 \operatorname{Id}) - \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} \nabla \rho \right] - \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \operatorname{div} \left(\rho \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \operatorname{Id} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \nabla \rho - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \nabla s = \\ &= \operatorname{div} \left[\left(\rho |\mathbf{u}|^2 + \rho \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) \operatorname{Id} \right] - \frac{1}{2} \operatorname{div}(\rho |\mathbf{u}|^2 \operatorname{Id}) - \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} \nabla \rho - \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \nabla \rho - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \nabla s = \\ &= \operatorname{div} \left(\left(\rho |\mathbf{u}|^2 + \rho \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) \operatorname{Id} \right) - \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \mathbf{K} \end{aligned}$$

avec

$$\mathbf{K} \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{2} \operatorname{div}(\rho |\mathbf{u}|^2 \operatorname{Id}) - \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} \nabla \rho - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \nabla \rho - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \nabla s.$$

Étant donné que

$$\begin{aligned} -\operatorname{div}(\rho |\mathbf{u}|^2 \operatorname{Id}) - |\mathbf{u}|^2 \nabla \rho &= -\operatorname{div}(\rho |\mathbf{u}|^2 \operatorname{Id}) - \mathbf{u} \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) + \rho \mathbf{u} \nabla \mathbf{u} = \\ &= -\operatorname{div}(\rho |\mathbf{u}|^2 \operatorname{Id}) - \mathbf{u} \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho |\mathbf{u}|^2 \operatorname{Id}) - \mathbf{u} \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = \\ &= 2\mathbf{u} \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) \end{aligned}$$

et puisqu'on a (8.14b), (8.14c) et (8.14d), on obtient

$$\mathbf{K} = \mathbf{u} \nabla \mathbf{j} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \nabla \rho - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \nabla s = \operatorname{div}(\mathcal{L} \operatorname{Id}).$$

L'équation portant sur la quantité de mouvement devient donc

$$\boxed{\partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \operatorname{div} \left(\left(\rho |\mathbf{u}|^2 + \rho \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) \operatorname{Id} \right) + \operatorname{div}(\mathcal{L} \operatorname{Id}) = 0.} \quad (8.15)$$

L'équation portant sur l'énergie totale $\rho e \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{j} \cdot \mathbf{u} - \mathcal{L}$ s'obtient ensuite en calculant $\partial_t(\rho e)$. Observons d'abord que

$$\partial_t(\rho e) = \mathbf{j} \partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \partial_t \mathbf{j} - \partial_t \mathcal{L}.$$

La dérivée temporelle du lagrangien s'écrit comme

$$\partial_t \mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{j}} \partial_t \mathbf{j} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \partial_t \rho + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \partial_t s + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} \partial_t y + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} \partial_t z + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} \partial_t \psi =$$

(en utilisant les (8.14b)-(8.14d))

$$= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{j}} \partial_t \mathbf{j} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \partial_t \rho + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \partial_t s =$$

(en utilisant les relations (8.9) et (8.11))

$$= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{j}} \partial_t \mathbf{j} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \operatorname{div}(\mathbf{j}) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \mathbf{u} \cdot \nabla s =$$

(en observant que $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{j}} = \mathbf{u}$)

$$= \mathbf{u} \partial_t \mathbf{j} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \operatorname{div}(\mathbf{j}) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \mathbf{u} \cdot \nabla s.$$

Ainsi on en déduit

$$\begin{aligned} \partial_t(\rho e) &= \mathbf{j} \partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \partial_t \mathbf{j} - \partial_t \mathcal{L} = \\ &= \mathbf{j} \partial_t \mathbf{u} + \cancel{\mathbf{u} \partial_t \mathbf{j}} - \cancel{\mathbf{u} \partial_t \mathbf{j}} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \operatorname{div}(\mathbf{j}) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \mathbf{u} \cdot \nabla s = \\ &= \mathbf{j} \partial_t \mathbf{u} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \operatorname{div}(\mathbf{j}) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \mathbf{u} \cdot \nabla s = \end{aligned}$$

(en utilisant (8.14a))

$$\begin{aligned} &= \mathbf{u} \left[-(\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{j} + \rho \nabla \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \nabla s \right] + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \operatorname{div}(\mathbf{j}) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \mathbf{u} \cdot \nabla s = \\ &= -\mathbf{u} \cdot (\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{j} + \mathbf{j} \nabla \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) - \cancel{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \mathbf{u} \cdot \nabla s} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \operatorname{div}(\mathbf{j}) + \cancel{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s} \mathbf{u} \cdot \nabla s} = \\ &= -\mathbf{u} \cdot (\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{j} + \mathbf{j} \nabla \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \operatorname{div}(\mathbf{j}) = \\ &= -\mathbf{u} \cdot (\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{j} + \operatorname{div} \left(\mathbf{j} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) = \\ &= -\rho \underbrace{\{\mathbf{u} \cdot [(\nabla \times \mathbf{u}) \times \mathbf{u}]\}}_0 + \operatorname{div} \left(\mathbf{j} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right). \end{aligned}$$

Donc l'équation d'énergie est donnée par

$$\partial_t(\rho e) - \operatorname{div} \left(\mathbf{j} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) = 0. \quad (8.16)$$

En conclusion on obtient le système

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) - \operatorname{div} \left(\left(\rho |\mathbf{u}|^2 + \rho \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) \operatorname{Id} \right) + \operatorname{div}(\mathcal{L} \operatorname{Id}) = 0, \\ \partial_t(\rho e) - \operatorname{div} \left(\rho \mathbf{u} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} \right) = 0, \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} = 0. \end{cases} \quad (8.17)$$

Soulignons que ces équations ont été établies avec une énergie interne quelconque. Il ne reste donc qu'à préciser une forme particulière de l'énergie interne ainsi qu'introduire une structure dissipative de façon à ce que le système tende vers le système (8.1).

8.1.3. Choix d'une énergie interne

Dans l'étude précédente nous avons utilisé un lagrangien $(\varepsilon, \mathbf{u}, \rho, y, z, \psi) \mapsto \mathcal{L}$ avec une énergie interne $(\rho, s, y, z, \psi) \mapsto \varepsilon$ quelconque. Dans cette partie, on exhibe une énergie interne particulière qui sera utilisée par la suite dans notre modèle de changement de phase.

Rappelons d'abord qu'au chapitre 2 on avait défini une entropie pour le système hors-équilibre qu'on avait notée $(\tau = 1/\rho, \varepsilon, z, y, \psi) \mapsto \tilde{\sigma}$. La fonction $(\tau, s) \mapsto (\tau, \varepsilon)$ étant un difféomorphisme local pour $T > 0$, on peut définir la fonction $(\rho, s, z, y, \psi) \mapsto \varepsilon^{\text{he}}$ comme $\tilde{\sigma}^{-1}$, soit

$$\varepsilon^{\text{he}} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \varepsilon_1(\rho, s) & \text{si } y = 1, \\ y \varepsilon_1 \left(\frac{z}{y} \tau, \frac{\psi}{y} s \right) + (1-y) \varepsilon_2 \left(\frac{1-z}{1-y} \tau, \frac{1-\psi}{1-y} s \right) & \text{si } 0 < y < 1, \\ \varepsilon_2(\rho, s) & \text{si } y = 0. \end{cases}$$

où ε_α est l'énergie interne de la phase α . La pression est définie alors classiquement par

$$(\tau = 1/\rho, s, y, z, \psi) \mapsto P = - \frac{\partial \varepsilon^{\text{he}}}{\partial \tau} \Big|_{s, y, z, \psi} = \begin{cases} P_1(\rho, s) & \text{si } y = 1, \\ z P_1 + (1-z) P_2 & \text{si } 0 < y < 1, \\ P_2(\rho, s) & \text{si } y = 0. \end{cases}$$

où on a noté P_α la pression de la phase α .

On suppose désormais que $\varepsilon = \varepsilon^{\text{he}}$. Alors, pour expliciter le système (8.17) sous une

forme particulière, il ne reste à calculer que le moment conjugué $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho}$. Puisque

$$\mathcal{L}(\rho, \mathbf{j}, s, y, z, \psi) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \rho |\mathbf{u}|^2 - \rho \varepsilon,$$

on a

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho} = \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} - \varepsilon - \rho \left. \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \right|_{\mathbf{u}, z, y, \psi} = \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} - \varepsilon + \frac{P}{\rho}$$

et le système (8.17) se réécrit sous la forme particulière

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = 0, \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = 0, \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} = 0, \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} = 0. \end{cases}$$

Observons que ce système, ne rendant pas compte des effets dissipatifs, est équivalent au système d'Euler fermé par la loi de changement de phase (8.1) car

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial z} = P_1 - P_2, \\ 0 &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} = s\rho(T_2 - T_1), \\ 0 &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} = -\rho(g_1 - g_2). \end{aligned}$$

8.1.4. Structure dissipative

On vient de présenter une formulation générique d'un sur-système (8.2). Cependant ce système ne rend pas compte des effets dissipatifs du changement de phase, c'est-à-dire du flux de masse entre les deux phases. Pour cela nous allons utiliser le second principe de la thermodynamique qui affirme que l'entropie ne peut que croître et donc que la production d'entropie doit être positive quel que soit le mouvement considéré.

En accord avec le choix de l'énergie interne, l'entropie (physique) est celle du mélange hors-équilibre de l'équation (2.10) à la page 37 qui, exprimée en variables $(y, z, \psi, \tau, \varepsilon)$, s'écrit

$$\tilde{s}(y, z, \psi, \tau, \varepsilon) = \begin{cases} s_1(\tau, \varepsilon) & \text{si } y = 1, \\ y s_1\left(\frac{z}{y}\tau, \frac{\psi}{y}\varepsilon\right) + (1-y)s_2\left(\frac{1-z}{1-y}\tau, \frac{1-\psi}{1-y}\varepsilon\right) & \text{si } 0 < y < 1, \\ s_2(\tau, \varepsilon) & \text{si } y = 0. \end{cases}$$

En accord avec le second principe de la thermodynamique, on impose la positivité de la production d'entropie :

$$\partial_t(\rho \tilde{s}) + \operatorname{div}(\rho \tilde{s} \mathbf{u}) \geq 0.$$

Puisque $\partial_t(\rho\tilde{\sigma}) + \text{div}(\rho\tilde{\sigma}\mathbf{u}) = \rho D_t\tilde{\sigma}$, on impose que

$$D_t\tilde{\sigma} = \frac{\partial\tilde{\sigma}}{\partial y} D_t y + \frac{\partial\tilde{\sigma}}{\partial z} D_t z + \frac{\partial\tilde{\sigma}}{\partial\psi} D_t\psi + \frac{\partial\tilde{\sigma}}{\partial\tau} D_t\tau + \frac{\partial\tilde{\sigma}}{\partial\varepsilon} D_t\varepsilon \geq 0.$$

Puisque

$$\begin{aligned}\frac{\partial\tilde{\sigma}}{\partial y} &= \sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} \frac{g_{\alpha}}{T_{\alpha}}, \\ \frac{\partial\tilde{\sigma}}{\partial z} &= \tau \sum_{\alpha} (-)^{\alpha} \frac{P_{\alpha}}{T_{\alpha}}, \\ \frac{\partial\tilde{\sigma}}{\partial\psi} &= \varepsilon \sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} \frac{1}{T_{\alpha}}, \\ \frac{\partial\tilde{\sigma}}{\partial\tau} &= \sum_{\alpha} z_{\alpha} \frac{P_{\alpha}}{T_{\alpha}}, \\ \frac{\partial\tilde{\sigma}}{\partial\varepsilon} &= \sum_{\alpha} \psi_{\alpha} \frac{1}{T_{\alpha}}\end{aligned}$$

et étant donné que

$$\left(\sum_{\alpha} z_{\alpha} \frac{P_{\alpha}}{T_{\alpha}} \right) D_t\tau + \left(\sum_{\alpha} \psi_{\alpha} \frac{1}{T_{\alpha}} \right) D_t\varepsilon = 0,$$

on obtient

$$D_t\tilde{\sigma} = \left(\sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} \frac{g_{\alpha}}{T_{\alpha}} \right) D_t y + \left(\tau \sum_{\alpha} (-)^{\alpha} \frac{P_{\alpha}}{T_{\alpha}} \right) D_t z + \left(\varepsilon \sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} \frac{1}{T_{\alpha}} \right) D_t\psi.$$

Le choix le plus naturel pour s'affranchir de la contrainte $D_t\tilde{\sigma} \geq 0$ est alors de poser

$$D_t y = \frac{1}{\mu_y} \left(\sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} \frac{g_{\alpha}}{T_{\alpha}} \right), \quad (8.18)$$

$$D_t z = \frac{1}{\mu_z} \left(\sum_{\alpha} (-)^{\alpha} \frac{P_{\alpha}}{T_{\alpha}} \right), \quad (8.19)$$

$$D_t\psi = \frac{1}{\mu_{\psi}} \left(\sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} \frac{1}{T_{\alpha}} \right), \quad (8.20)$$

où $\frac{1}{\mu_j} \geq 0$, $j = y, z, \psi$, sont des paramètres de relaxation correspondant aux temps de retour aux équilibres chimique, mécanique et thermodynamique respectivement. L'équation sur l'entropie s'écrit donc

$$\partial_t(\rho\tilde{\sigma}) + \text{div}(\rho\tilde{\sigma}\mathbf{u}) = \frac{\rho}{\mu_y} \left(\sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} \frac{g_{\alpha}}{T_{\alpha}} \right)^2 + \frac{1}{\mu_z} \left(\sum_{\alpha} (-)^{\alpha} \frac{P_{\alpha}}{T_{\alpha}} \right)^2 + \frac{\rho\varepsilon}{\mu_{\psi}} \left(\sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} \frac{1}{T_{\alpha}} \right)^2.$$

Système HRM En négligeant le terme source $\mathbf{S}(\mathbf{V})$, le système HRM (8.2) s'écrit alors

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = \mathbf{0}, \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P) \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} z = \frac{1}{\mu_z} \left(\tau \sum_{\alpha} (-)^{\alpha} \frac{P_{\alpha}}{T_{\alpha}} \right), \\ \partial_t y + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} y = \frac{1}{\mu_y} \left(\sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} \frac{g_{\alpha}}{T_{\alpha}} \right), \\ \partial_t \psi + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} \psi = \frac{1}{\mu_{\psi}} \left(\varepsilon \sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} \frac{1}{T_{\alpha}} \right), \end{cases} \quad (8.21)$$

où la pression est définie par

$$(\tau = 1/\rho, \varepsilon, y, z, \psi) \mapsto P \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \frac{(s_1)_{\tau}}{(s_1)_{\varepsilon}} = P_1(\tau, \varepsilon) & \text{si } y = 1, \\ \frac{\tilde{\sigma}_{\tau}}{\tilde{\sigma}_{\varepsilon}} = z P_1 \left(\frac{z}{y} \tau, \frac{\psi}{y} \varepsilon \right) + (1-z) P_2 \left(\frac{1-z}{1-y} \tau, \frac{1-\psi}{1-y} \varepsilon \right) & \text{si } 0 < y < 1, \\ \frac{(s_2)_{\tau}}{(s_2)_{\varepsilon}} = P_2(\tau, \varepsilon) & \text{si } y = 0. \end{cases}$$

Remarquons que c'est également le système utilisé par Helluy [46].

Avec ce choix on peut alors conclure par la proposition suivante qui assure que le système (8.21), pris à l'équilibre isotherme-isobare-equipotentiel, correspond au système d'Euler muni de la fermeture $P = P^{\text{eq}}$.

► **PROPOSITION 8.1:**

En imposant formellement l'équilibre isotherme-isobare-equipotentiel au système (8.21) on retrouve le système (8.1) fermé par la loi de changement de phase $P = P^{\text{eq}}$. ◇

PREUVE.

On passe à l'équilibre en faisant tendre les paramètres μ_j , $j = y, z, \psi$, vers 0. Ceci revient à imposer formellement $T_1 = T_2$, $P_1 = P_2$ et $g_1 = g_2$ ce qui correspond au système (8.1). ♦

★ **REMARQUE 8.1 (TERMES SOURCES DE CHANGEMENT DE PHASE).** Avec cette écriture les trois équations portant sur les fractions (z, y, ψ) sont définies seulement dans le mélange. On assume implicitement que, lorsqu'on est dans une phase pure, le système se réduit au système des équations d'Euler monophasique classique. ♣

8.1.5. Nature et propriétés du système HRM à six équations

La partie convective du système (8.21) est simplement le système des équations d'Euler hors équilibre (c'est-à-dire le système où la pression est calculée à partir de l'entropie hors équilibre $\tilde{\sigma}$ de la définition 2.10 à la page 37) auquel on ajoute la convection des trois fractions

$$\begin{cases} \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} z = 0, \\ \partial_t y + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} y = 0, \\ \partial_t \psi + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} \psi = 0. \end{cases}$$

On s'intéresse tout d'abord à la nature de la partie convective du sur-système (8.21) en commençant par analyser sa structure propre. Sans perte de généralité, l'ensemble

de l'étude sera développé en 1D. Soit donc $\mathbf{V} \stackrel{\text{def}}{=} (\rho, u, \varepsilon, y, z, \psi)^t$. Dans le cadre des solutions régulières, la partie convective du système (8.21) se réécrit de manière équivalente

$$\partial_t \mathbf{V} + \mathbb{B}(\mathbf{V}) \partial_x \mathbf{V} = \mathbf{0},$$

où la matrice $\mathbb{B}(\mathbf{V})$ est donnée par

$$\mathbb{B}(\mathbf{V}) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} u & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{P_\rho}{\rho} & u & \frac{P_\varepsilon}{\rho} & \frac{P_y}{\rho} & \frac{P_z}{\rho} & \frac{P_\psi}{\rho} \\ 0 & \frac{P}{\rho} & u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u \end{pmatrix},$$

où

$$\begin{aligned} P_\rho &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial P}{\partial \rho} \Big|_{\varepsilon, y, z, \psi}, & P_\varepsilon &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} \Big|_{\rho, y, z, \psi}, \\ P_y &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial P}{\partial y} \Big|_{\rho, \varepsilon, z, \psi}, & P_z &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial P}{\partial z} \Big|_{\rho, \varepsilon, y, \psi}, & P_\psi &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial P}{\partial \psi} \Big|_{\rho, \varepsilon, y, z}. \end{aligned}$$

La nature du système, indépendante du jeu de variables utilisé pour déterminer sa structure propre, est alors donnée à la proposition suivante.

► **PROPOSITION 8.2:**

Sous les hypothèses de monotonie (2.3) et de concavité (2.4) des entropies monophasiques, la partie convective du système (8.21) est hyperbolique. \diamond

PREUVE.

La nature du système (8.21) dépend des propriétés de la matrice \mathbb{B} . On détermine tout d'abord ses valeurs propres en résolvant $\det(\mathbb{B}(\mathbf{V}) - \lambda \text{Id}) = 0$ et on trouve

$$\lambda_1 = u - c, \quad \lambda_{2,3,4,5} = u, \quad \lambda_6 = u + c,$$

où c est la vitesse du son dont le carré s'écrit

$$c^2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial P}{\partial \rho} \Big|_{\varepsilon, y, z, \psi} + \frac{P}{\rho^2} \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} \Big|_{\rho, y, z, \psi}.$$

Puisque $\tau = 1/\rho$ on peut réécrire

$$c^2 = \begin{cases} -\tau^2 T \begin{bmatrix} P & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (s_1)_{\tau\tau} & (s_1)_{\tau\varepsilon} \\ (s_1)_{\tau\varepsilon} & (s_1)_{\varepsilon\varepsilon} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P \\ -1 \end{bmatrix} & \text{si } y = 1, \\ -\tau^2 T \begin{bmatrix} P & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\sigma}_{\tau\tau} & \tilde{\sigma}_{\tau\varepsilon} \\ \tilde{\sigma}_{\tau\varepsilon} & \tilde{\sigma}_{\varepsilon\varepsilon} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P \\ -1 \end{bmatrix} & \text{si } 0 < y < 1, \\ -\tau^2 T \begin{bmatrix} P & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (s_2)_{\tau\tau} & (s_2)_{\tau\varepsilon} \\ (s_2)_{\tau\varepsilon} & (s_2)_{\varepsilon\varepsilon} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P \\ -1 \end{bmatrix} & \text{si } y = 0. \end{cases}$$

Dans l'étude de la structure propre associé au système (8.21), deux cas se distinguent suivant que l'on considère un état monophasique ($y \in \{0, 1\}$) ou un état de mélange hors équilibre ($0 < y < 1$).

- ☛ Si $y = 0$ ou bien $y = 1$ l'état \mathbf{V} est un état monophasique. La pression ne dépend alors que de ρ et ε et les vecteurs propres à droite respectivement associés sont :

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1^{\text{déf}} &= \begin{pmatrix} \rho \\ -c \\ P/\rho \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & \mathbf{r}_2^{\text{déf}} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & \mathbf{r}_3^{\text{déf}} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{r}_4^{\text{déf}} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, & \mathbf{r}_5^{\text{déf}} &= \begin{pmatrix} -P_\varepsilon \\ 0 \\ P_\rho \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, & \mathbf{r}_6^{\text{déf}} &= \begin{pmatrix} \rho \\ c \\ P/\rho \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Puisque $c \equiv c_1 > 0$ si $y = 0$ et $c \equiv c_2 > 0$ si $y = 1$, le système est hyperbolique.

- ☛ Si $0 < y < 1$ l'état \mathbf{V} est un état de mélange hors équilibre. Les vecteurs propres à droite respectivement associés sont :

$$\mathbf{r}_1^{\text{déf}} = \begin{pmatrix} \rho \\ -c \\ P/\rho \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_2^{\text{déf}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -P_z \\ P_y \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_3^{\text{déf}} = \begin{pmatrix} P_y \\ 0 \\ 0 \\ -P_\rho \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{r}_4 \stackrel{\text{déf}}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ P_y \\ -P_\varepsilon \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_5 \stackrel{\text{déf}}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -P_\psi \\ 0 \\ P_y \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_6 \stackrel{\text{déf}}{=} \begin{pmatrix} \rho \\ c \\ P/\rho \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

On obtient

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{\tau\tau} &= \frac{z^2}{y}(s_1)_{\tau_1\tau_1} + \frac{(1-z)^2}{(1-y)}(s_2)_{\tau_2\tau_2}, \\ \tilde{\sigma}_{\varepsilon\varepsilon} &= \frac{\psi^2}{y}(s_1)_{\varepsilon_1\varepsilon_1} + \frac{(1-\psi)^2}{(1-y)}(s_2)_{\varepsilon_2\varepsilon_2}, \\ \tilde{\sigma}_{\tau\varepsilon} &= \frac{z\psi}{y}(s_1)_{\tau_1\varepsilon_1} + \frac{(1-z)(1-\psi)}{(1-y)}(s_2)_{\tau_2\varepsilon_2}. \end{aligned}$$

Si on prouve que la matrice hessienne

$$\mathbf{d}^2\tilde{\sigma} \stackrel{\text{déf}}{=} \begin{bmatrix} \tilde{\sigma}_{\tau\tau} & \tilde{\sigma}_{\tau\varepsilon} \\ \tilde{\sigma}_{\tau\varepsilon} & \tilde{\sigma}_{\varepsilon\varepsilon} \end{bmatrix}$$

est définie négative alors on aura $c > 0$ et donc que le système est hyperbolique.

Puisque les entropies monophasiques ont, par hypothèse 2.2 à la page 29, des matrices hessiennes définies négatives on a les inégalités

$$(s_\alpha)_{\tau_\alpha\tau_\alpha} > 0, \quad (s_\alpha)_{\varepsilon_\alpha\varepsilon_\alpha} > 0, \quad (s_\alpha)_{\tau_\alpha\tau_\alpha}(s_\alpha)_{\varepsilon_\alpha\varepsilon_\alpha} > ((s_\alpha)_{\tau_\alpha\varepsilon_\alpha})^2,$$

d'où immédiatement

$$\tilde{\sigma}_{\tau\tau} > 0 \quad \text{et} \quad \tilde{\sigma}_{\varepsilon\varepsilon} > 0.$$

Pour prouver que la matrice hessienne de $\tilde{\sigma}$ est définie négative il ne reste à prouver que $\tilde{\sigma}_{\tau\tau}\tilde{\sigma}_{\varepsilon\varepsilon} > (\tilde{\sigma}_{\tau\varepsilon})^2$. On observe que

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{\tau\tau}\tilde{\sigma}_{\varepsilon\varepsilon} &= \frac{z^2\psi^2}{y^2}(s_1)_{\tau_1\tau_1}(s_1)_{\varepsilon_1\varepsilon_1} + \frac{(1-z)^2(1-\psi)^2}{(1-y)^2}(s_2)_{\tau_2\tau_2}(s_2)_{\varepsilon_2\varepsilon_2} + \\ &+ \frac{z^2(1-\psi)^2}{y(1-y)}(s_1)_{\tau_1\tau_1}(s_2)_{\varepsilon_2\varepsilon_2} + \frac{(1-z)^2\psi^2}{y(1-y)}(s_2)_{\tau_2\tau_2}(s_1)_{\varepsilon_1\varepsilon_1} > \\ &> \frac{z^2\psi^2}{y^2}((s_1)_{\tau_1\varepsilon_1})^2 + \frac{(1-z)^2(1-\psi)^2}{(1-y)^2}((s_2)_{\tau_2\varepsilon_2})^2 + \\ &+ \frac{z^2(1-\psi)^2}{y(1-y)}(s_1)_{\tau_1\tau_1}(s_2)_{\varepsilon_2\varepsilon_2} + \frac{(1-z)^2\psi^2}{y(1-y)}(s_2)_{\tau_2\tau_2}(s_1)_{\varepsilon_1\varepsilon_1} \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} (\tilde{\sigma}_{\tau\varepsilon})^2 &= \frac{z^2\psi^2}{y^2}((s_1)_{\tau_1\varepsilon_1})^2 + \frac{(1-z)^2(1-\psi)^2}{(1-y)^2}((s_2)_{\tau_2\varepsilon_2})^2 + \\ &+ 2\frac{z(1-z)\psi(1-\psi)}{y(1-y)}(s_1)_{\tau_1\varepsilon_1}(s_2)_{\tau_2\varepsilon_2}. \end{aligned}$$

Pour que $\tilde{\sigma}_{\tau\tau}\tilde{\sigma}_{\varepsilon\varepsilon} > (\tilde{\sigma}_{\tau\varepsilon})^2$ il suffit de prouver que

$$\begin{aligned} & z^2(1-\psi)^2(s_1)_{\tau_1\tau_1}(s_2)_{\varepsilon_2\varepsilon_2} + (1-z)^2\psi^2(s_2)_{\tau_2\tau_2}(s_1)_{\varepsilon_1\varepsilon_1} \geq \\ & \geq 2z(1-z)\psi(1-\psi)(s_1)_{\tau_1\varepsilon_1}(s_2)_{\tau_2\varepsilon_2}. \end{aligned}$$

Or

$$\begin{aligned} & z^2(1-\psi)^2(s_1)_{\tau_1\tau_1}(s_2)_{\varepsilon_2\varepsilon_2} + (1-z)^2\psi^2(s_2)_{\tau_2\tau_2}(s_1)_{\varepsilon_1\varepsilon_1} = \\ & = \left(z(1-\psi)\sqrt{(s_1)_{\tau_1\tau_1}(s_2)_{\varepsilon_2\varepsilon_2}} - (1-z)\psi\sqrt{(s_2)_{\tau_2\tau_2}(s_1)_{\varepsilon_1\varepsilon_1}} \right)^2 + \\ & \quad + 2z(1-z)\psi(1-\psi)\sqrt{(s_1)_{\tau_1\tau_1}(s_2)_{\varepsilon_2\varepsilon_2}(s_2)_{\tau_2\tau_2}(s_1)_{\varepsilon_1\varepsilon_1}} > \\ & > \left(z(1-\psi)\sqrt{(s_1)_{\tau_1\tau_1}(s_2)_{\varepsilon_2\varepsilon_2}} - (1-z)\psi\sqrt{(s_2)_{\tau_2\tau_2}(s_1)_{\varepsilon_1\varepsilon_1}} \right)^2 + \\ & \quad + 2z(1-z)\psi(1-\psi)(s_1)_{\tau_1\varepsilon_1}(s_2)_{\tau_2\varepsilon_2} \end{aligned}$$

donc $c > 0$ et le système est hyperbolique.

En conclusion, le système HRM (8.21) est donc hyperbolique (non strictement car on a une valeur propre de multiplicité 4). ♦

8.2. Dérivation d'autres sur-systèmes

Soulignons que le choix du sur-système n'est pas unique. On pourrait par exemple définir différemment les termes sources et considérer le système suivant à la place du système (8.21)

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = \mathbf{0}, \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} z = -\frac{1}{\mu_z} z(1-z) \left(\tau \sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} \frac{P_{\alpha}}{T_{\alpha}} \right), \\ \partial_t y + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} y = \frac{1}{\mu_y} y(1-y) \left(\sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} \frac{g_{\alpha}}{T_{\alpha}} \right), \\ \partial_t \psi + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} \psi = \frac{1}{\mu_{\psi}} \psi(1-\psi) \left(\varepsilon \sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} \frac{1}{T_{\alpha}} \right). \end{cases} \quad (8.22)$$

Ce choix à l'avantage d'avoir des termes sources bien définis dans les phases pures aussi.

Sinon, on peut considérer des relaxations partielles du système (8.21). Par exemple on peut prendre comme système HRM le système suivant qui en est une version re-

laxée en température

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = 0, \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P) \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} z = -\frac{1}{\mu_z} \left(\frac{\tau}{T} \sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} P_{\alpha} \right), \\ \partial_t y + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} y = \frac{1}{\mu_y} \left(\frac{1}{T} \sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} g_{\alpha} \right), \\ T_1 = T_2. \end{array} \right. \quad (8.23)$$

Ou encore relaxer en température et en pression en obtenant le système

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = 0, \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P) \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t y + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} y = \frac{1}{\mu_y} \left(\frac{1}{T} \sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} g_{\alpha} \right), \\ P_1 = P_2, \\ T_1 = T_2 \end{array} \right. \quad (8.24)$$

Ou encore une relaxation pas très usuelle comme $\sum_{\alpha} (-)^{\alpha+1} \frac{P_{\alpha}}{T_{\alpha}} = 0$ et bien d'autres.

Parmi tous ces possibles systèmes nous avons choisi comme système HRM, de la même façon que Caro [21], le système à cinq équations avec fermeture isotherme (8.23) car on a réutilisé un code existant : la partie convective de ce système coïncide en effet avec le système étudié par Allaire *et al.* [1], Kokh [60] pour lequel les auteurs ont fait une étude approfondie et ont proposé une méthode numérique efficace.

★ **REMARQUE 8.2 (SUR LES TEMPS DE RELAXATION).** Les paramètres μ_j contrôlent les vitesses à lesquelles les équilibres des pressions, des températures et des potentiels chimiques sont atteints. Dans la grande majorité des situations physiques mettant en jeu des vrais mélanges de fluides (ce qui n'est pas tout à fait notre situation), ces équilibres sont atteints très rapidement, bien qu'en général en des temps différents. Très rapidement signifie en fait plus rapidement que le pas de temps hydrodynamique. C'est pourquoi en pratique les trois coefficients tendront vers zéro en même temps et à la même vitesse. ❀

★ **REMARQUE 8.3 (SUR LES TERMES SOURCES DE RELAXATION).** Dans les systèmes précédents les termes sources sont définis seulement dans l'interface et on les suppose nuls dans chaque phase pure. On aimerait cependant avoir une unique définition valable partout. Ceci est immédiat pour le système (8.24) lorsque les deux phases sont décrites par deux lois de type gaz parfait polytropique : soit

$$(\tau_{\alpha}, \varepsilon_{\alpha}) \mapsto s_{\alpha} \stackrel{\text{déf}}{=} c_{v_{\alpha}} \ln(\varepsilon_{\alpha} \tau_{\alpha}^{\gamma_{\alpha}-1}) + \widehat{s}_{\alpha}$$

la loi d'état de chaque phase pure α avec $c_{v\alpha}$ et γ_α qui vérifient les hypothèses du chapitre 5. On pose $\Gamma_\alpha \stackrel{\text{def}}{=} \gamma_\alpha - 1$. Alors $T_\alpha = c_{v\alpha} / \varepsilon_\alpha$ et $P_\alpha = \Gamma_\alpha \varepsilon_\alpha / \tau_\alpha$ et on obtient

$$g_\alpha(T_\alpha, P_\alpha) = c_{v\alpha} T_\alpha [\gamma_\alpha - \ln(c_{v\alpha}^\gamma \Gamma_\alpha^\Gamma) - \gamma_\alpha \ln T_\alpha + \Gamma_\alpha \ln P_\alpha].$$

On a supposé une fermeture isotherme isobare donc $T_1 = T_2 \stackrel{\text{def}}{=} T$, $P_1 = P_2 \stackrel{\text{def}}{=} P$ et la pression à saturation dans l'interface $T \mapsto P^{\text{sat}}(T)$ est obtenue en résolvant l'équation $g_1(P, T) = g_2(P, T)$. On obtient la relation (5.10) qu'on rappelle ici

$$T \mapsto P^{\text{sat}} \stackrel{\text{def}}{=} \mathfrak{A} T^{c_{v1} \gamma_1 - c_{v2} \gamma_2}.$$

Ainsi le terme source

$$R \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \frac{1}{T} \sum_\alpha (-)^{\alpha+1} g_\alpha & \text{dans l'interface,} \\ 0 & \text{ailleurs,} \end{cases}$$

se réécrit

$$R = \ln P - \ln P^{\text{eq}}$$

où

$$P = \begin{cases} \frac{\sigma_\tau}{\sigma_\varepsilon} & \text{dans l'interface,} \\ P_\alpha & \text{ailleurs,} \end{cases} \quad P^{\text{eq}} = \begin{cases} P^{\text{sat}} & \text{dans l'interface,} \\ P_\alpha & \text{ailleurs.} \end{cases}$$

Donc le système (8.24) se réécrit

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = 0, \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P) \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t y + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} y = \frac{1}{\mu_y} (\ln P - \ln P^{\text{eq}}) \end{cases} \quad (8.25) \quad \clubsuit$$

où le terme source est bien défini dans les phases pures aussi.

8.2.1. Nature et propriétés du système à cinq équations avec fermeture isotherme

Le système homogène

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = 0, \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P) \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} z = 0, \\ \partial_t y + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} y = 0, \\ T_1 = T_2 \end{cases} \quad (8.26)$$

a été introduit et étudié par Allaire *et al.* [1], Kokh [60] (des systèmes similaires peuvent être trouvés par exemple dans Murrone et Guillard [82]). On rappelle ici simplement quelques propriétés de ce système. Des méthodes numériques pour l'approcher seront rappelées au prochain chapitre.

On prouve d'abord la proposition 8.3 qui assure que le système à six équations (8.21) et le système à cinq équations avec fermeture isotherme (8.23) sont consistants, autrement dit qu'il existe une et une seule valeur de la fraction d'énergie ψ solution de l'équation $T_1 = T_2$.

➡ **PROPOSITION 8.3 (CONSISTANCE, ALLAIRE *et al.* (1), KOKH (60)):**

Pour tout $(\tau, \varepsilon, y, z) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+ \times]0, 1[\times [0, 1]$, le système

$$\begin{cases} T_1 \left(\frac{z}{y} \tau, \varepsilon_1 \right) = T_2 \left(\frac{1-z}{1-y} \tau, \varepsilon_2 \right), \\ y \varepsilon_1 + (1-y) \varepsilon_2 = \varepsilon, \end{cases}$$

admet toujours une et une seule solution $(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$. ◇

PREUVE.

Pour $\psi \in [0, 1]$ on définit une fonction $\varphi : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ par

$$\varphi(\psi) \stackrel{\text{def}}{=} T_1 \left(\frac{z}{y} \tau, \frac{\psi}{y} \varepsilon \right) - T_2 \left(\frac{1-z}{1-y} \tau, \frac{1-\psi}{1-y} \varepsilon \right).$$

Par construction les fonctions T_α sont au moins de classe \mathcal{C}^1 et positives et on peut dériver φ

$$\begin{aligned} \varphi'(\psi) &= \frac{\partial T_1}{\partial \psi} - \frac{\partial T_2}{\partial \psi} = \\ &= \frac{\partial T_1}{\partial \varepsilon_1} \Big|_{\tau_1} \frac{\partial \varepsilon_1}{\partial \psi} - \frac{\partial T_2}{\partial \varepsilon_2} \Big|_{\tau_2} \frac{\partial \varepsilon_2}{\partial \psi} = \end{aligned}$$

et puisque $T_\alpha = \frac{1}{(s_\alpha)_{\varepsilon_\alpha}}$ on obtient

$$\begin{aligned} &= -\frac{(s_1)_{\varepsilon_1 \varepsilon_1}}{(s_1)_{\varepsilon_1}^2} \frac{\partial \varepsilon_1}{\partial \psi} + \frac{(s_2)_{\varepsilon_2 \varepsilon_2}}{(s_2)_{\varepsilon_2}^2} \frac{\partial \varepsilon_2}{\partial \psi} = \\ &= -\frac{\varepsilon T_1^2}{y} (s_1)_{\varepsilon_1 \varepsilon_1} - \frac{\varepsilon T_2^2}{1-y} (s_2)_{\varepsilon_2 \varepsilon_2} \end{aligned}$$

qui est donc positif. Ainsi, φ est monotone croissante ; de plus, pour le troisième principe de la thermodynamique, $\lim_{\varepsilon_\alpha \rightarrow 0} T_\alpha(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) = 0$, d'où $\varphi(0) = T_1(\frac{z}{y} \tau, 0) - T_2(\frac{1-z}{1-y} \tau, 0) = -T_2 < 0$ et de la même façon $\varphi(1) = T_1 > 0$. Il existe donc un et un seul $\hat{\psi} \in]0, 1[$ annulant φ . En posant

$$\varepsilon_1 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\psi}{y} \varepsilon, \quad \varepsilon_2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1-\psi}{1-y} \varepsilon,$$

on a le résultat souhaité. ◆

Pour étudier l'hyperbolicité du système (8.26), sans perte de généralité nous nous

plaçons dans un cadre 1D. On observe d'abord que la différentielle de la pression $P(m_1, m_2, \rho u, \rho e, z)$ peut être écrite sous la forme (voir Allaire *et al.* [1, lemme 5.1])

$$dP = \sum_{\alpha} \frac{1}{\xi} \left(\frac{u^2}{2} - \delta_{\alpha} \right) dm_{\alpha} - \frac{u}{\xi} d(\rho u) + \frac{1}{\xi} d(\rho e) + M dz,$$

où on a indiqué $m_{\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} \rho_{\alpha} z_{\alpha}$, $z_1 \stackrel{\text{def}}{=} z$ et $z_2 \stackrel{\text{def}}{=} 1 - z$ et les coefficients ξ , δ_{α} et M sont définis par

$$\begin{cases} \frac{1}{\xi} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\rho c_v} \sum_{\alpha} z_{\alpha} \left. \frac{\partial P_{\alpha}}{\partial T_{\alpha}} \right|_{\rho_{\alpha}}, \\ \delta_{\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} -\xi \left. \frac{\partial P_{\alpha}}{\partial \rho_{\alpha}} \right|_{T_{\alpha}} + h_{\alpha} - d_{\rho_{\alpha}}^{T_{\alpha}} \left. \frac{\partial P_{\alpha}}{\partial T_{\alpha}} \right|_{\rho_{\alpha}}, \\ M \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial P}{\partial z}, \end{cases} \quad (8.27)$$

avec $\rho c_v \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\alpha} m_{\alpha} c_{v_{\alpha}}$. Dorénavant notons

$$\beta_{\alpha} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\frac{u^2}{2} - \delta_{\alpha}}{\xi} \quad \text{et} \quad H \stackrel{\text{def}}{=} e + P/\rho,$$

H étant l'enthalpie totale molaire du mélange. Considérons ensuite des solutions régulières $\mathbf{V} \stackrel{\text{def}}{=} (m_1, m_2, \rho u, \rho e, z)^t$ du système (8.26). Ce système est alors équivalent au système

$$\partial_t \mathbf{V} + \mathbb{A}(\mathbf{V}) \partial_x \mathbf{V} = 0,$$

où la matrice $\mathbb{A}(\mathbf{V})$ est définie par

$$\mathbb{A}(\mathbf{V}) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} u(1-y) & -uy & y & 0 & 0 \\ -u(1-y) & uy & (1-y) & 0 & 0 \\ (\beta_1 - u^2) & (\beta_2 - u^2) & (2 - 1/\xi)u & 1/\xi & M \\ u(\beta_1 - H) & u(\beta_2 - H) & (H - u^2/\xi) & u(1 + 1/\xi) & uM \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u \end{pmatrix}. \quad (8.28)$$

Les valeurs propres de $\mathbb{A}(\mathbf{V})$ sont

$$\lambda_1(\mathbf{V}) \stackrel{\text{def}}{=} u - c, \quad \lambda_2(\mathbf{V}) = \lambda_3(\mathbf{V}) = \lambda_4(\mathbf{V}) \stackrel{\text{def}}{=} u, \quad \lambda_5(\mathbf{V}) \stackrel{\text{def}}{=} u + c,$$

où c est la vitesse du son qui vérifie

$$\rho c^2 = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \left. \frac{\partial P_{\alpha}}{\partial \rho_{\alpha}} \right|_{T_{\alpha}} + \frac{T}{\rho c_v} \left(\sum_{\alpha} z_{\alpha} \left. \frac{\partial P_{\alpha}}{\partial T_{\alpha}} \right|_{\rho_{\alpha}} \right)^2, \quad (8.29)$$

c_{α} désignant la vitesse du son de la phase α . Les vecteurs propres \mathbf{l}_k à gauches et \mathbf{r}_k à droites associés à la valeur propre λ_k sont défini par

$$\begin{aligned}
 \mathbf{l}_1(\mathbf{V}) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2c^2} \begin{bmatrix} \beta_1 + uc \\ \beta_2 + uc \\ -c - u/\xi \\ 1/\xi \\ M \end{bmatrix}, & \mathbf{r}_1(\mathbf{V}) &\stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} y \\ (1-y) \\ u - c \\ H - uc \\ 0 \end{bmatrix}, \\
 \mathbf{l}_2(\mathbf{V}) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\xi c^2} \begin{bmatrix} (1-y)(\delta_1 - u^2/2) \\ \xi c^2 + (1-y)(\delta_2 - u^2/2) \\ u(1-y) \\ -(1-y) \\ -(1-y)M \end{bmatrix}, & \mathbf{r}_2(\mathbf{V}) &\stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ u \\ \frac{u^2}{2} + \delta_2 \\ 0 \end{bmatrix}, \\
 \mathbf{l}_3(\mathbf{V}) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\xi c^2} \begin{bmatrix} \xi c^2 + y(\delta_1 - u^2/2) \\ y(\delta_2 - u^2/2) \\ uy \\ -y \\ -yM \end{bmatrix}, & \mathbf{r}_3(\mathbf{V}) &\stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ u \\ \frac{u^2}{2} + \delta_1 \\ 0 \end{bmatrix}, \\
 \mathbf{l}_4(\mathbf{V}) &\stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, & \mathbf{r}_4(\mathbf{V}) &\stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -M\xi \\ 1 \end{bmatrix}, \\
 \mathbf{l}_5(\mathbf{V}) &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2c^2} \begin{bmatrix} \beta_1 - uc \\ \beta_2 - uc \\ c - u/\xi \\ 1/\xi \\ M \end{bmatrix}, & \mathbf{r}_5(\mathbf{V}) &\stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} y \\ (1-y) \\ u + c \\ H + uc \\ 0 \end{bmatrix}.
 \end{aligned}$$

Ceci prouve que le système (8.26) est hyperbolique bien que l'entropie du système ne soit pas strictement concave par rapport aux variables z et $1 - z$.

Avant de passer au schéma numérique, remarquons que l'écriture de la vitesse du son (8.29) peut être généralisée en utilisant les coefficients ξ et δ_α

$$\xi c^2 = h - \sum_{\alpha} y_{\alpha} \delta_{\alpha}, \quad (8.30)$$

avec $h = \varepsilon + P/\rho$ l'enthalpie molaire du mélange et $y_1 = y$, $y_2 = 1 - y$.

★ **REMARQUE 8.4.** Pour plus de détails et pour les démonstrations faire référence à l'article déjà cité de Allaire *et al.* [1] ou à la thèse de Kokh [60]. ❀

8.3. Couple HRM/HEM retenu

Le sur-système que l'on considère (appelé brièvement HRM pour *homogeneous relaxation model*), ainsi que le système équilibre associé (appelé HEM pour *homogeneous equilibrium model*), sont donc résumés à la figure 8.2 avec $e \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} + \varepsilon$ l'énergie totale molaire et $\frac{1}{\mu_j}$, $j = z, y$, les paramètres de relaxation qui correspondent aux temps de retour aux équilibres mécanique, chimique et thermodynamique. On a l'hypothèse sous-entendue que les termes sources, qui avec cette écriture sont bien définis seulement dans l'interface, sont pris égaux à zéro dans les phases pures (voir aussi la remarque 8.3 à la page 245).

HRM : système à cinq équations avec fermeture isotherme

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = 0 \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = 0 \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} z = \frac{1}{\mu_z} \frac{P_2 - P_1}{T} \\ \partial_t y + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} y = \frac{1}{\mu_y} \frac{g_1 - g_2}{\rho T} \end{cases}$$

$$P(\tau = 1/\rho, \varepsilon, z, y) = zP_1\left(\frac{z}{y}\tau, \frac{\psi}{y}\varepsilon\right) + (1-z)P_2\left(\frac{1-z}{1-y}\tau, \frac{1-\psi}{1-y}\varepsilon\right)$$

$$\psi \text{ t.q. } T_1\left(\frac{z}{y}\tau, \frac{\psi}{y}\varepsilon\right) = T_2\left(\frac{1-z}{1-y}\tau, \frac{1-\psi}{1-y}\varepsilon\right)$$

Formellement
↓
 $\mu_z, \mu_y \rightarrow 0$

HEM : système à saturation

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P^{\text{eq}}) = 0 \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P^{\text{eq}})\mathbf{u}) = 0 \end{cases}$$

$$P^{\text{eq}}(\rho = 1/\tau, \varepsilon) = \frac{s_\tau^{\text{eq}}}{s_\varepsilon^{\text{eq}}}$$

FIG. 8.2.: Couple HRM-HEM retenu.

8.4. Schémas numériques basés sur le système HRM

Nous pouvons maintenant nous intéresser à l'étude proprement dite des schémas numériques associés au processus de relaxation. Tous ces schémas sont basés sur le sur-système. Indépendamment du sur-système choisi, deux approches sont toujours possibles :

- ❶ ou bien résoudre le système

$$\partial_t \mathbf{V} + \operatorname{div} \mathbf{G}(\mathbf{V}) = \mathbf{S}(\mathbf{V}) + \frac{1}{\mu} \mathbf{R}(\mathbf{V})$$

directement avec un schéma qui sait traiter à la fois les termes sources classiques (ici regroupés sous le terme $\mathbf{S}(\mathbf{V})$) ainsi que des termes sources raides (ici notés globalement $\frac{1}{\mu} \mathbf{R}(\mathbf{V})$),

- ❷ ou bien résoudre le système

$$\partial_t \mathbf{V} + \operatorname{div} \mathbf{G}(\mathbf{V}) = \mathbf{S}(\mathbf{V}) + \frac{1}{\mu} \mathbf{R}(\mathbf{V})$$

par une décomposition d'opérateurs séparant la résolution des termes classiques de la résolution des termes raides. Schématiquement chaque pas de temps est résolu en deux étapes :

étape 1 : c'est une étape de transport hydrodynamique où l'on résout le sur-système en négligeant les termes de relaxation (équivalent à supposer $\mu_j = +\infty$)

$$\partial_t \mathbf{V} + \operatorname{div} \mathbf{G}(\mathbf{V}) = \mathbf{S}(\mathbf{V});$$

(on verra au prochain chapitre que la prise en compte éventuelle d'autres phénomènes physiques tels la gravité, la tension de surface et la diffusion thermique fait partie de cette étape); à l'issue de cette étape le système se trouve dans un état hors équilibre (c'est-à-dire que dans la zone de co-existence des deux phases en toute généralité on aura $T_1 \neq T_2$, $P_1 \neq P_2$ et $g_1 \neq g_2$). Cet état est caractérisé par le sextuplet $(\tau, \varepsilon, \mathbf{u}, y, z, \psi)$ où les fractions (y, z, ψ) seront mises à jour lors de la prochaine étape ;

étape 2 : c'est l'étape de relaxation où l'on projette la solution ainsi obtenue sur la variété d'équilibre décrite par

$$\mathbf{R}(\mathbf{V}) = \mathbf{0};$$

ceci équivaut à supposer $\mu_j = 0$, c'est à dire un retour à l'équilibre instantanée. Lors de cette étape les termes de relaxation forcent le système à évoluer vers l'état d'équilibre isotherme-isobare-equipotentiel défini à l'issue de l'étape de transport. C'est seulement dans cette étape qu'on prend en compte le changement de phase.

Dans le prochain chapitre on verra comment mettre en œuvre numériquement la deuxième stratégie ainsi que la prise en compte des termes sources $\mathbf{S}(\mathbf{V})$.

8.5. Conclusion

Dans la partie précédente, dans le cadre des transitions de phase liquide-vapeur, on a donné les équations vérifiées par l'écoulement. Une fois le cadre mathématique bien établi, il aurait été intéressant d'écrire un solveur de Riemann exact pour le système des équations d'Euler fermé par la loi de changement de phase, suivant les lignes de la thèse de Voß [96] pour une loi de type Van der Waals.

Même si cette démarche aurait fourni une solution de référence, toutefois elle n'aurait pas permis d'écrire un code de calcul exploitable industriellement. De plus, à cause de la discontinuité de la vitesse du son à la traversée de la courbe de saturation, la résolution numérique avec des méthodes d'approximation classiques (comme les schémas de Lax-Friedrich ou de Roe ou les schémas ENO, HLLC, HLLE etc., voir par exemple Toro [93] pour une description) est plutôt compliquée en pratique (voir notamment la thèse de Voß [96] qui les a comparé avec sa solution de référence pour une loi de Van der Waals avec correction de Maxwell).

Au vu de tous ces limitations, nous avons préféré adopter une approche de type «relaxation». Le cœur des approches de relaxation est la construction d'un sur-système (c'est à dire un système avec plus d'équations et plus d'inconnues) qui contient des termes sources avec des coefficients de relaxation. Ce système doit être tel que, lorsque ces paramètres de relaxation tendent vers zéro, on retrouve au moins formellement le système du départ.

Dans ce chapitre nous avons donc construit ce sur-système : comme dans Caro *et al.* [22; 24], Gavriluk et Gouin [38], Gavriluk et Saurel [39], on a déduit les équations de ce système par minimisation de l'action hamiltonienne sous la contrainte de la conservation de la masse et de l'entropie. On a ainsi obtenu un système à six équations. Ensuite, en imposant la positivité de la production d'entropie, on en a déduit les termes sources portant sur les fractions de masse, de volume et d'énergie. Ces termes sources étant précisément les conditions d'optimalité pour la maximisation de l'entropie de mélange, nous avons alors montré que le système des équations d'Euler avec changement de phase peut être obtenu comme limite de relaxation de ce système augmenté à six équations contenant des termes sources de relaxation : lorsque les temps caractéristiques de la transition de phase tendent vers zéro, le système augmenté tend vers l'équilibre thermodynamique modélisant ainsi le phénomène du changement de phase.

CHAPITRE 9

Schéma numérique

9.1 Schéma	257
9.2 Étape 1 : résolution du sur-système sans les termes de relaxation	261
9.2.1 Étape 1.A : Advection	261
9.2.2 Étape 1.B : Diffusion de la chaleur	270
9.2.3 Étape 1.C : Gravité	275
9.2.4 Étape 1.D : Capillarité	276
9.3 Étape 2 : projection sur la variété d'équilibre.	278
9.4 Conclusion.	279

Résumé

AU CHAPITRE PRÉCÉDENT on a décidé d'approcher le modèle de changement de phase, décrit par les équations d'Euler avec la loi d'état d'équilibre, par une méthode de relaxation. On a alors construit plusieurs sur-systèmes avec des termes sources de relaxation. Parmi ces systèmes on a retenu le système à cinq équations avec fermeture isotherme et deux paramètres de relaxation (8.23).

Dans ce chapitre, avant de passer à l'écriture d'un schéma numérique pour la résolution de ce système, on introduit d'abord trois autres phénomènes physiques qui jouent un rôle majeur dans les changements de phase par ébullition nucléée : la gravité, la diffusion de la chaleur et la tension de surface¹. En revanche, on ne prend pas en compte la viscosité.

Une fois le système établi, on présente le schéma numérique retenu. Il s'agit d'un schéma classique de décomposition d'opérateurs connus sous le nom de «schéma de relaxation». Chaque pas de temps

¹Dans les simulations numériques ces phénomènes ne seront pas toujours pris en compte. En général ils seront négligés lors de changements de phase dus simplement à la cavitation.

est divisé en deux étapes : hydrodynamique sans termes sources, puis relaxation des quantités thermodynamiques en maximisant l'entropie du mélange hors équilibre. On détaille chaque étape de ce schéma.

Pour simuler l'ébullition nucléée, le système d'Euler à l'équilibre HEM ainsi que le sur-système HRM doivent être modifiés afin de prendre en compte la gravité, la diffusion de la chaleur et la tension de surface. Bien que d'autres phénomènes physiques puissent jouer un rôle dans certaines configurations d'ébullition nucléée (comme par exemple la viscosité), dans nos tests on se limitera aux trois forces écrites ci-dessus.

Diffusion de la chaleur

Si la température du fluide n'est pas constante il y a un transfert de chaleur grâce à ce que l'on appelle «conduction thermique». Ceci signifie le transfert direct de l'énergie d'un point où la température est plus haute à un où elle est inférieure. Ceci ne provoque pas de mouvement macroscopique et il a lieu lorsque le fluide est au repos. Indiquons par \mathbf{q} le flux de chaleur dû à la conduction thermique. Ce flux est lié à la variation de la température dans le fluide. On peut alors développer \mathbf{q} en série de puissance du gradient de la température et on prend le premier terme non nul du développement (Landau et Lifshitz [64]). La constante (terme d'ordre zéro) est zéro évidemment car \mathbf{q} doit être nul lorsque $\mathbf{grad} T = \mathbf{0}$. On obtient ainsi la «loi de Fourier»²

$$\mathbf{q} = -\vartheta \mathbf{grad} T.$$

La constante ϑ est dite «conductivité thermique» et elle est positive (car le flux d'énergie est dirigé du point à température supérieure vers celui à température inférieure), ainsi \mathbf{q} et $\mathbf{grad} T$ ont des directions opposées.

L'équation d'énergie, complétée par un terme de diffusion de chaleur, devient alors

$$\partial_t(\rho e) + \text{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = -\text{div}(\vartheta \mathbf{grad} T).$$

Observons que dans l'interface le terme $\text{div}(\vartheta \mathbf{grad} T)$ est obtenu par sommation des termes diffusifs des équations d'énergie de chaque phase, ce qui donne :

$$\vartheta = z\vartheta_1 + (1 - z)\vartheta_2.$$

Autrement dit, la conductivité thermique est fonction de z et donc de la position, mais elle est néanmoins continue si z est continu.

Cette approche est la plus simple qui puisse être choisie dans un premier temps. Elle pourra être raffinée ensuite en utilisant la forme générale où la conductivité thermique n'est plus isotrope.

Gravité

Plaçons-nous en deux dimensions d'espace. Si on pose $\mathbf{g}^{\text{def}}(0, -\tilde{g})$, avec $\tilde{g} = 9.81 \text{ N}$, les équations portant sur la quantité de mouvement et sur l'énergie sont modifiées par

²On néglige dans cette étude l'influence d'un éventuel flux radiatif ou d'une source d'énergie volumique.

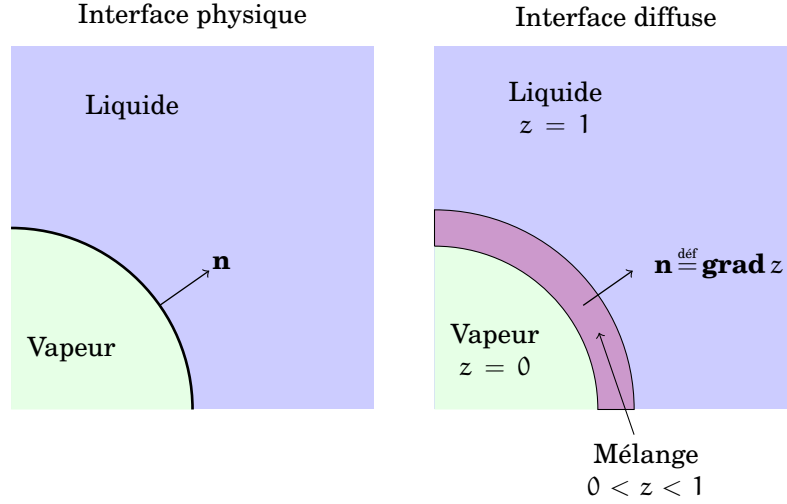


FIG. 9.1.: Reformulation de la tension de surface en une force volumique

l'ajout d'un terme source

$$\begin{cases} \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = \rho \mathbf{g}, \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P) \mathbf{u}) = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u}, \end{cases}$$

où on a noté $e \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} + \varepsilon$.

Tension de surface

Loin de toute paroi les effets de tension de surface (dite aussi de *capillarité*) se manifestent par un saut de pression de part et d'autre d'interfaces non planes, par exemple dans le cas de bulles de vapeur. L'intensité de ce saut est le produit de la courbure moyenne locale k de l'interface par le coefficient de tension de surface ζ entre les deux fluides $\llbracket P \rrbracket = \zeta k$, relation connue sous le nom de «loi de Laplace» (voir par exemple Landau et Lifshitz [64]). Pour rendre compte de cet effet, il faut ajouter cette relation de saut aux équations de bilan de quantité de mouvement et d'énergie.

Cependant cette formulation nécessite une localisation précise de la surface qui sépare le liquide de la vapeur et donc ne peut pas être utilisée directement dans notre modèle basé sur des interfaces diffuses. C'est dans ce contexte que Brackbill *et al.* [17] ont développé une approche, dite CSF (*Continuum Surface Force*), qui modélise la force de tension de surface à l'aide de la force volumique

$$\mathfrak{T} \stackrel{\text{def}}{=} -\zeta k(z) \mathbf{n}(z),$$

où ζ est le coefficient de tension de surface caractérisant la nature des fluides de part et d'autre de l'interface, k et \mathbf{n} sont respectivement des approximations de la courbure et de la normale dans la zone d'application de la tension de surface volumique (voir la

figure 9.1). Ils sont définis par

$$\mathbf{n}(z) \stackrel{\text{déf}}{=} \mathbf{grad} z, \quad k(z) \stackrel{\text{déf}}{=} \text{div} \left(\frac{\mathbf{n}}{|\mathbf{n}|} \right).$$

Puisque

$$\text{div}(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) = (\text{div} \mathbf{a})\mathbf{b} + (\mathbf{a} \cdot \mathbf{grad})\mathbf{b}$$

pour tout \mathbf{a}, \mathbf{b} de \mathbb{R}^d et puisque

$$\left(\frac{\mathbf{n}}{|\mathbf{n}|} \cdot \mathbf{grad} \right) \mathbf{n} = \text{div}(|\mathbf{n}| \text{Id}),$$

on a donc le tenseur

$$\mathfrak{T} = -\zeta \text{div} \left(\frac{\mathbf{n} \otimes \mathbf{n}}{|\mathbf{n}|} - |\mathbf{n}| \text{Id} \right),$$

qui peut se réécrire comme

$$\mathfrak{T} = \zeta \frac{\mathbf{n}}{|\mathbf{n}|} \left(\left(\frac{\mathbf{n}}{|\mathbf{n}|} \cdot \mathbf{grad} \right) |\mathbf{n}| - \text{div} \mathbf{n} \right).$$

Les équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie deviennent

$$\begin{cases} \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \text{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \text{Id}) = \mathfrak{T}, \\ \partial_t(\rho e) + \text{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = \mathfrak{T} \cdot \mathbf{u}. \end{cases}$$

Bien que notre schéma numérique soit basé sur cette écriture, rappelons qu'il est possible de réécrire le système contenant la tension de surface sous une forme conservative. En effet il semblerait que l'écriture d'un schéma numérique basé sur la forme conservative permet de s'affranchir du problème de l'apparition d'ondes parasites, mais la question est encore ouverte. Parmi ces versions conservatives rappelons la forme CSS (*Continuum Surface Stress*) décrite dans la thèse de Chantepredrix [25] ou encore la version de Perigaud et Saurel [84]. Cette démarche peut être également appliquée au tenseur de viscosité suivant encore les lignes de Perigaud et Saurel [84].

★ **REMARQUE 9.1.** Dans Allaire *et al.* [1], Kokh [60] la tension de surface porte sur la fraction volumique z et c'est cette approche qu'on a retenu lors de nos simulations. Toutefois soulignons qu'il est possibles de réécrire le tenseur \mathfrak{T} avec la fraction de masse y au lieu de z : c'est la stratégie suivie par Perigaud et Saurel [84] dans le cadre du système à cinq équations avec fermeture isobare de Allaire *et al.* [1]. ❀

Système à résoudre

En conclusion, le système HRM sur lequel sera basé notre schéma numérique est celui-ci

$$\begin{cases}
 \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\
 \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = \rho \mathbf{g} + \mathfrak{T}, \\
 \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = (\rho \mathbf{g} + \mathfrak{T}) \cdot \mathbf{u} - \operatorname{div}(\vartheta \mathbf{grad} T), \\
 \text{Dans l'interface} \begin{cases}
 \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} z = \frac{1}{\mu_z} \frac{P_2 - P_1}{T}, \\
 \partial_t y + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} y = \frac{1}{\mu_y} \frac{g_1 - g_2}{\rho T},
 \end{cases} \\
 P(\rho, \varepsilon, z, y) = z P_1\left(\frac{z}{y} \frac{1}{\rho}, \frac{\psi}{y} \varepsilon\right) + (1 - z) P_2\left(\frac{1-z}{1-y} \frac{1}{\rho}, \frac{1-\psi}{1-y} \varepsilon\right), \\
 e \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} + \varepsilon; \\
 \psi \text{ t.q. } T_1\left(\frac{z}{y} \frac{1}{\rho}, \frac{\psi}{y} \varepsilon\right) = T_2\left(\frac{1-z}{1-y} \frac{1}{\rho}, \frac{1-\psi}{1-y} \varepsilon\right).
 \end{cases} \quad (9.1)$$

Lorsque μ_z et μ_y tendent vers zéro, ce système tend vers le système d'Euler à l'équilibre avec termes source suivant

$$\begin{cases}
 \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\
 \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P^{\text{eq}} \operatorname{Id}) = \rho \mathbf{g} + \mathfrak{T}, \\
 \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P^{\text{eq}})\mathbf{u}) = (\rho \mathbf{g} + \mathfrak{T}) \cdot \mathbf{u} - \operatorname{div}(\vartheta \mathbf{grad} T), \\
 P^{\text{eq}}(\rho = 1/\tau, \varepsilon) = \frac{s_\tau^{\text{eq}}}{s_\varepsilon^{\text{eq}}}, \\
 e \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} + \varepsilon.
 \end{cases} \quad (9.2)$$

9.1. Schéma

On s'intéresse maintenant à la résolution numérique du sur-système (9.1) dans lequel on fait tendre les coefficients μ_j vers zéro ; on construit ainsi un schéma numérique pour approcher la solution du système HEM (9.2).

De manière générale, on cherche des schémas pour simuler un système du type

$$\partial_t \mathbf{V} + \operatorname{div} \mathbf{G}(\mathbf{V}) = \mathbf{S}(\mathbf{V}) + \frac{1}{\mu} \mathbf{R}(\mathbf{V}). \quad (9.3)$$

Deux type d'approches sont envisageables :

- ① utiliser un schéma qui résout directement le système (9.3) ; le problème principal de ce type d'approche est la prise en compte des termes sources classiques en même temps que les termes sources raides ; un schéma qui répond à cette requête est par exemple le schéma de Dumbser *et al.* [32] ;
- ② utiliser une méthode de décomposition d'opérateurs qui sépare le traitement des termes sources classiques du traitement des termes sources raides (et on parle alors de «schéma de relaxation»).

Bien que la première méthode ait l'avantage de s'affranchir du calcul explicite de la loi de changement de phase, c'est la seconde approche qu'on a retenue dans cette thèse. Ce choix est dicté d'une part parce que c'est une méthode plutôt simple à mettre en œuvre et d'autre part parce qu'elle permet d'utiliser des schémas numériques pré-existants pour la partie de transport hydrodynamique.

La philosophie des schémas de relaxation est de séparer artificiellement les phases lors de l'étape de transport hydrodynamique avant de les «remélanger» lors de l'étape de projection sur l'équilibre. De façon très succincte, la mise en œuvre numérique de cette décomposition d'opérateurs est la suivante : chaque pas de temps est divisé en deux étapes, la première d'hydrodynamique, la deuxième de relaxation des quantités thermodynamiques par projection sur la variété d'équilibre. Plus spécifiquement (voir la figure 9.2 à la page 260) :

1. dans une première étape on résout le modèle à cinq équations avec fermeture isotherme sans les termes sources de changement de phase. Si on indique par \mathbf{V}^n le vecteur des variables $(m_1, m_2, \rho\mathbf{u}, \rho e, z)$ à l'instant t^n , alors on construit un vecteur intermédiaire $\mathbf{V}^{n+1/2}$ comme solution du système $\partial_t \mathbf{V} + \text{div } \mathbf{G}(\mathbf{V}) = \mathbf{S}(\mathbf{V})$:

$$\mathbf{V}^n \xrightarrow[\partial_t \mathbf{V} + \text{div } \mathbf{G}(\mathbf{V}) = \mathbf{S}(\mathbf{V})]{\text{Étape 1}} \mathbf{V}^{n+1/2}.$$

Concrètement, le terme source $\mathbf{S}(\mathbf{V})$ regroupe les effets de diffusion de la chaleur, de la gravité et de la tension de surface et on peut le réécrire comme

$$\mathbf{S}(\mathbf{V}) = \mathbf{S}_{\text{ch}}(\mathbf{V}) + \mathbf{S}_{\text{gr}}(\mathbf{V}) + \mathbf{S}_{\text{ts}}(\mathbf{V})$$

La première étape est alors elle même découpée en plusieurs sous-pas pour traiter séparément l'hydrodynamique (résolution du système d'EDP $\partial_t \mathbf{V} + \text{div } \mathbf{G}(\mathbf{V}) = \mathbf{0}$), puis la diffusion de la chaleur (résolution de l'EDP $\partial_t \mathbf{V} = \mathbf{S}_{\text{ch}}(\mathbf{V})$), ensuite la gravité (résolution du système d'EDO $\partial_t \mathbf{V} = \mathbf{S}_{\text{gr}}(\mathbf{V})$) et enfin la tension de surface (résolution du système d'EDP $\partial_t \mathbf{V} = \mathbf{S}_{\text{ts}}(\mathbf{V})$) :

$$\mathbf{V}^n \xrightarrow[\partial_t \mathbf{V} + \text{div } \mathbf{G}(\mathbf{V}) = \mathbf{0}]{\text{Étape 1.A}} \mathbf{V}^{n+1/8} \xrightarrow[\partial_t \mathbf{V} = \mathbf{S}_{\text{ch}}(\mathbf{V})]{\text{Étape 1.B}} \mathbf{V}^{n+2/8} \xrightarrow[\partial_t \mathbf{V} = \mathbf{S}_{\text{gr}}(\mathbf{V})]{\text{Étape 1.C}} \mathbf{V}^{n+3/8} \xrightarrow[\partial_t \mathbf{V} = \mathbf{S}_{\text{ts}}(\mathbf{V})]{\text{Étape 1.D}} \mathbf{V}^{n+1/2},$$

2. dans la deuxième étape on prend en compte les termes sources de changement de phase : connaissant les variables thermodynamiques phasiques issues de la première étape, on maximise l'entropie hors équilibre et on obtient ainsi de nouvelles valeurs des concentrations phasiques (i.e. de z , y et ψ) :

$$\mathbf{V}^{n+1/2} \xrightarrow[\partial_t \mathbf{V} = \frac{1}{\mu} \mathbf{R}(\mathbf{V})]{\text{Étape 2}} \mathbf{V}^{n+1}.$$

D'un point de vue physique, nous supposons que l'échelle de temps liée au processus de retour à l'équilibre est petite devant celle associée aux opérateurs de propagation, par conséquent le processus de relaxation sera supposé instantané.

Ainsi, les pressions et les potentiels de Gibbs seront à l'équilibre à l'issue de cette étape (la température est toujours à l'équilibre dans le mélange par construction). En pratique ceci se traduit par une projection de la solution sur la variété d'équilibre thermodynamique :

$$\mathbf{V}^{n+1/2} \xrightarrow[\mathbf{R}(\mathbf{V})=\mathbf{0}]{\text{Étape 2}} \mathbf{V}^{n+1}.$$

Concrètement, si on note

$$\mathbf{V}^{n+1/2} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \rho^{n+1/2} \\ (\rho \mathbf{u})^{n+1/2} \\ (\rho e)^{n+1/2} \\ z^{n+1/2} \\ y^{n+1/2} \end{pmatrix},$$

alors le vecteur à l'instant $n + 1$ est le vecteur

$$\mathbf{V}^{n+1} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \rho^{n+1/2} \\ (\rho \mathbf{u})^{n+1/2} \\ (\rho e)^{n+1/2} \\ z^{n+1} \\ y^{n+1} \end{pmatrix}$$

où z^{n+1} et y^{n+1} sont calculés en résolvant $\mathbf{R}(\mathbf{V}^{n+1/2}) = \mathbf{0}$, c'est-à-dire en résolvant l'équation de changement de phase de la définition 2.10 à la page 55.

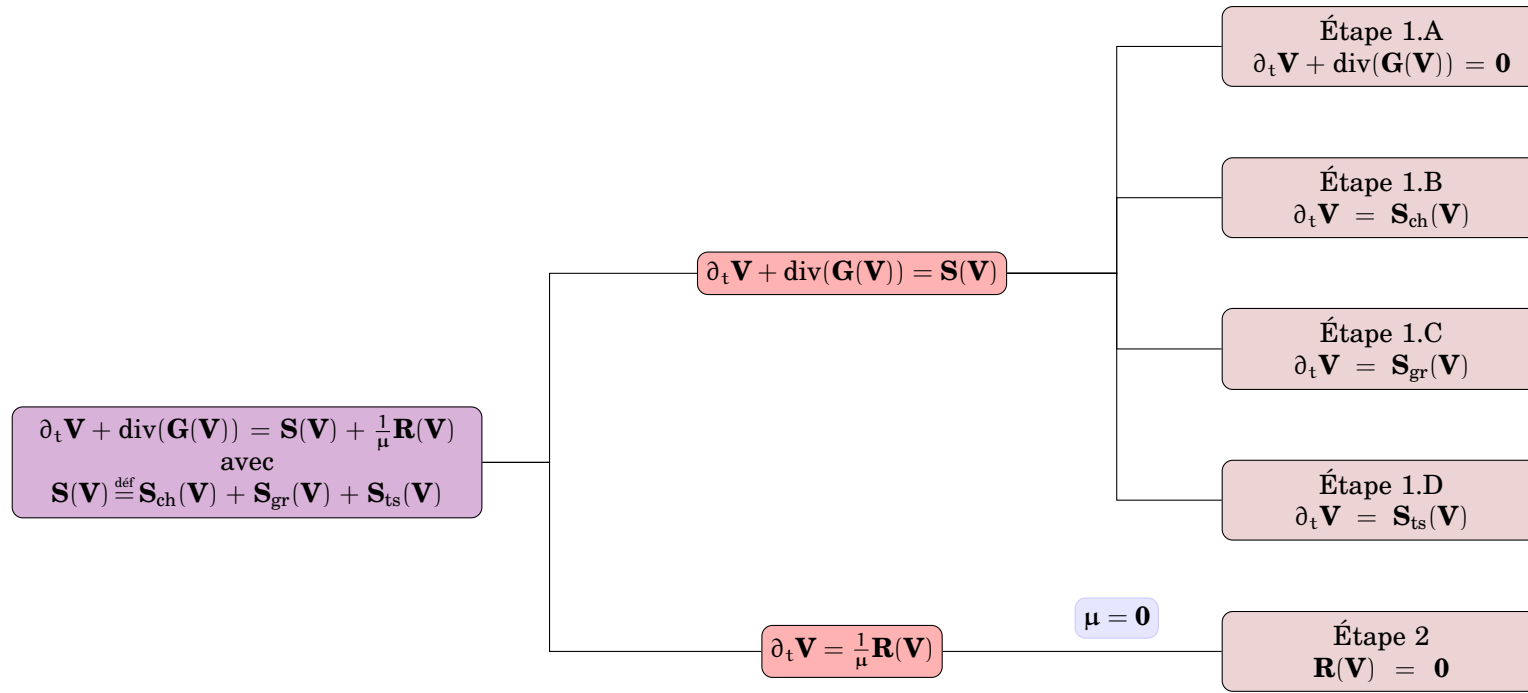


FIG. 9.2.: Schéma de résolution par décomposition d'opérateurs avec relaxation instantanée.

9.2. Étape 1 : résolution du sur-système sans les termes de relaxation

On s'intéresse dans ce paragraphe à l'approximation numérique du système

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = \rho \mathbf{g} + \mathfrak{T}, \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P) \mathbf{u}) = (\rho \mathbf{g} + \mathfrak{T}) \cdot \mathbf{u} - \operatorname{div}(\vartheta \operatorname{grad} T), \\ \partial_t y + \mathbf{u} \cdot \operatorname{grad} y = 0, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \operatorname{grad} z = 0, \\ T_1 = T_2. \end{cases} \quad (9.4)$$

De la même façon que dans Kokh [60], on utilise une décomposition d'opérateurs qui prend en compte séparément les phénomènes de propagation d'ondes acoustiques et matériels des effets dissipatifs, des effets capillaires et de la gravité. Ceci revient à résoudre le système (9.4) en quatre sous-étapes qu'on notera comme suit :

étape 1.A : advection,

étape 1.B : diffusion de la chaleur,

étape 1.C : gravité,

étape 1.D : capillarité.

9.2.1. Étape 1.A : Advection

Dans cette première sous-étape on utilise un schéma numérique pour la résolution du système à cinq équations homogène. En 2D, en termes de variables conservatives $(\rho, \rho \mathbf{u}, \rho e, \rho y, \rho z)$, on peut écrire le système sous la forme

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = 0, \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P) \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho y) + \operatorname{div}(\rho y \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho z) + \operatorname{div}(\rho z \mathbf{u}) = 0. \end{cases} \quad (9.5)$$

On a vu à la section 8.2.1 à la page 246 que ce système est hyperbolique.

On va maintenant présenter un schéma pour son approximation. L'intégration numérique de ce système est réalisée grâce à une méthode de type volume finis où les flux numériques sont calculés à l'aide du solveur de Riemann approché de type Roe (décrit par Allaire *et al.* [1] et Kokh [60]) qu'on va rappeler ci-dessous.

Réécrivons d'abord le système (9.5) sous la forme quasi-conservative

$$\begin{cases} \partial_t(m_1) + \operatorname{div}(m_1 \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(m_2) + \operatorname{div}(m_2 \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \operatorname{Id}) = 0, \\ \partial_t(\rho e) + \operatorname{div}((\rho e + P) \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \mathbf{grad} z = 0, \end{cases} \quad (9.6)$$

où $m_1 \stackrel{\text{def}}{=} z \rho_1$ et $m_2 \stackrel{\text{def}}{=} (1 - z) \rho_2$.

Schéma numérique en 1D Pour simplifier la présentation nous nous plaçons d'abord dans un cadre unidimensionnel. Soit $i \in \mathbb{Z}$, $n \in \mathbb{N}$, notons $\Delta x > 0$ le pas d'espace et $\Delta t > 0$ le pas de temps. On appelle

$$\mathbf{W} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ \rho u \\ \rho e \end{pmatrix}$$

et on note \mathbf{W}_i^n et z_i^n l'approximation avec les volumes finis de \mathbf{W} et z dans la maille i à l'instant $t_n \stackrel{\text{def}}{=} n \Delta t$:

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_i^n &\approx \frac{1}{\Delta x} \int_{(i-1/2)\Delta x}^{(i+1/2)\Delta x} \mathbf{W}(x, t_n) dx, \\ z_i^n &\approx \frac{1}{\Delta x} \int_{(i-1/2)\Delta x}^{(i+1/2)\Delta x} z(x, t_n) dx. \end{aligned}$$

Le pas convectif est discrétisé comme suit

$$\begin{cases} \mathbf{W}_i^{n+1/8} = \mathbf{W}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathbf{G}_{i+1/2}(\mathbf{W}^n, z^n) - \mathbf{G}_{i-1/2}(\mathbf{W}^n, z^n)], \\ z_i^{n+1/8} = z_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathbf{H}_{i+1/2}(\mathbf{W}^n, z^n) - \mathbf{H}_{i-1/2}(\mathbf{W}^n, z^n)]. \end{cases}$$

On va donc détailler comment calculer les flux numériques \mathbf{G} et \mathbf{H} .

Linéarisation de type Roe Notons $\mathbf{V} \stackrel{\text{def}}{=} (\mathbf{W}, z)$ et considérons deux états \mathbf{V}_L et \mathbf{V}_R respectivement à gauche et à droite de l'interface $i + 1/2$ qui sépare la maille i de la maille $i + 1$. On utilise les notations classiques

$$\Delta a \stackrel{\text{def}}{=} a_R - a_L, \quad \bar{a} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sqrt{\rho_L} a_L + \sqrt{\rho_R} a_R}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}, \quad \underline{a} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sqrt{\rho_L} a_R + \sqrt{\rho_R} a_L}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}.$$

Notons

$$\mathbf{G}_{i+1/2}(\mathbf{V}^n) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{G}(\mathbf{V}_i^n, \mathbf{V}_{i+1}^n),$$

c'est à dire

$$\mathbf{G}_{i+1/2}(\mathbf{W}^n, z^n) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{G}((\mathbf{W}_i^n, z_i^n), (\mathbf{W}_{i+1}^n, z_{i+1}^n)).$$

Si on pose

$$\mathbf{G}(\mathbf{V}_L, \mathbf{V}_R) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} m_1 u \\ m_2 u \\ \rho u^2 + P \\ (\rho e + P)u \end{pmatrix}_L + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} m_1 u \\ m_2 u \\ \rho u^2 + P \\ (\rho e + P)u \end{pmatrix}_R - \frac{1}{2} \mathbf{R}(\mathbf{V}_L, \mathbf{V}_R),$$

le schéma numérique pour les variables \mathbf{W} sera connu si on définit le vecteur \mathbf{R} . Pour cela considérons une matrice $\mathbb{A}^* \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{A}(\mathbf{V}^*)$ qui est, dans un certain sens, une moyenne des matrices jacobienues $\mathbb{A}(\mathbf{V}_L)$ et $\mathbb{A}(\mathbf{V}_R)$ avec $\mathbb{A}(\mathbf{V})$ définie à l'équation (8.28) à la page 248. La structure de \mathbb{A}^* assure que cette matrice est diagonalisable (on a prouvé à la section 8.2.1 à la page 246 que le système est hyperbolique). De plus, comme pour une linéarisation classique de Roe, on demande à ce que \mathbb{A}^* vérifie des relations de saut, à savoir

$$\begin{pmatrix} \Delta(m_1 u) \\ \Delta(m_2 u) \\ \Delta(\rho u^2 + P) \\ \Delta((\rho e + P)u) \\ u^* \Delta z \end{pmatrix} = \mathbb{A}^* \Delta \mathbf{V}. \quad (9.7)$$

La relation (9.7) est basée sur les relations de Rankine-Hugoniot qui sont valables pour le système (9.6) mais elle a été écrite en termes des variables quasi-conservatives $\mathbf{V} = (\mathbf{W}, z)$ au lieu des variables conservatives $(\mathbf{W}, \rho z)$ qui seraient utilisées dans une approche de Roe classique.

Pour les paramètres qui définissent la matrice \mathbb{A}^* on a la proposition suivante (les notations sont celles introduites à la section 8.2.1 à la page 246).

► **PROPOSITION 9.1 (ALLAIRE *et al.* (1)):**

Soit $\mathbb{A}^* \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{A}(\mathbf{V}^*)$ où les coefficients y_α^* , z^* , u^* , H^* et ξ^* sont définis par

$$\begin{cases} y_\alpha^* &= \overline{y_\alpha}, \\ z^* &= \overline{z}, \\ u^* &= \overline{u}, \\ H^* &= \overline{H}, \\ \xi^* &= \overline{\xi}. \end{cases}$$

S'il existe des états intermédiaires δ_1^* , δ_2^* et M^* vérifiant la relation de saut discrète

$$\Delta(\rho e) = \xi^* \Delta P - \xi^* M^* \Delta z + \sum_{\alpha} \delta_\alpha^* \Delta(m_\alpha), \quad (9.8)$$

alors la matrice \mathbb{A}^* vérifie la relation de saut (9.7). \diamond

Calcul de \mathbf{R} Dorénavant on suppose que la matrice \mathbb{A}^* est celle de la proposition 9.1.

Pour $j = 1, \dots, 5$, on note λ_j^* , \mathbf{l}_j^* et \mathbf{r}_j^* respectivement la j -ième valeur propre de la matrice \mathbb{A}^* et le vecteur propre à gauche et à droite associé (voir la section 8.2.1 à la page 246). Dans un schéma de Roe classique le vecteur \mathbf{R} serait défini par $|\mathbb{A}^*| \Delta \mathbf{V}$, dans ce schéma on prend seulement les premières quatre composantes. Plus spécifiquement, pour $k = 1, \dots, 4$, la k -ième composante de \mathbf{R} s'écrit

$$\mathbf{R}_k \stackrel{\text{def}}{=} (|\mathbb{A}^*| \cdot \Delta \mathbf{V})_k = \sum_{j=1}^{j=5} |\lambda_j^*| \beta_j^*(\mathbf{r}_j^*)_k, \quad k = 1, \dots, 4, \quad (9.9)$$

où les coefficients sont définie par $\beta_j^*(\mathbf{V}) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{l}_j^*(\mathbf{V}) \cdot \Delta \mathbf{V}$. Puisque par hypothèse la matrice \mathbb{A}^* est celle de la proposition 9.1, un peu d'algèbre montre que les coefficients β_j vérifient les relations

$$\begin{aligned} \beta_1(\mathbf{V}^*) &= \frac{1}{2(c^*)^2} (\Delta P - \underline{\rho} c^* \Delta u), \\ \beta_2(\mathbf{V}^*) &= \frac{1}{(c^*)^2} \left(-\overline{(1-y)} \Delta P + (c^*)^2 \Delta m_2 \right), \\ \beta_3(\mathbf{V}^*) &= \frac{1}{(c^*)^2} \left(-\bar{y} \Delta P + (c^*)^2 \Delta m_1 \right), \\ \beta_4(\mathbf{V}^*) &= \Delta z, \\ \beta_5(\mathbf{V}^*) &= \frac{1}{2(c^*)^2} (\Delta P + \underline{\rho} c^* \Delta u). \end{aligned}$$

En conclusion le vecteur \mathbf{R} est défini par

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\mathbf{V}_R, \mathbf{V}_L) &\stackrel{\text{def}}{=} |\bar{u} - c^*| \beta_1(\mathbf{V}^*) \begin{bmatrix} \bar{y} \\ \overline{(1-y)} \\ \bar{u} - c^* \\ \bar{H} - \bar{u} c^* \end{bmatrix} + |\bar{u}| \beta_2(\mathbf{V}^*) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \bar{u} \\ 0 \end{bmatrix} + \\ &+ |\bar{u}| \beta_3(\mathbf{V}^*) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \bar{u} \\ 0 \end{bmatrix} + |\bar{u}| \beta_4(\mathbf{V}^*) \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ B \end{bmatrix} + |\bar{u} + c| \beta_5(\mathbf{V}^*) \begin{bmatrix} \bar{y} \\ \overline{(1-y)} \\ \bar{u} + c \\ \bar{H} + \bar{u} c^* \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

où B est

$$B \stackrel{\text{def}}{=} \left(\Delta \rho - \frac{\Delta P}{(c^*)^2} \right) \frac{\bar{u}^2}{2} + \Delta(\rho \varepsilon) - \frac{h^*}{(c^*)^2} \Delta P = -\frac{H^*}{(c^*)^2} \Delta P + \frac{\bar{u}^2}{2} \Delta \rho + \Delta(\rho \varepsilon).$$

On remarque que le calcul de M^* n'est pas nécessaire.

En conclusion, le schéma numérique pour les quatre premières composantes de \mathbf{V} s'écrit

$$\mathbf{W}_i^{n+1/8} = \mathbf{W}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\mathbf{G}_{i+1/2}^n - \mathbf{G}_{i-1/2}^n \right],$$

où le flux numérique $\mathbf{G}_{i+1/2}(\mathbf{V}^n)$ est donné par

$$\mathbf{G}_{i+1/2}^n = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} m_1 u \\ m_2 u \\ \rho u^2 + P \\ (\rho e + P)u \end{pmatrix}_i^n + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} m_1 u \\ m_2 u \\ \rho u^2 + P \\ (\rho e + P)u \end{pmatrix}_{i+1}^n - \frac{1}{2} \mathbf{R}(\mathbf{V}_i^n, \mathbf{V}_{i+1}^n). \quad (9.10)$$

Calcul de z La fraction volumique z est advectée en utilisant un schéma upwind classique

$$z_i^{n+1/s} = z_i^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left((u_i^n - |u_i^n|) \Delta z_{i+1/2}^n + (u_i^n + |u_i^n|) \Delta z_{i-1/2}^n \right).$$

Extension au second ordre en espace Le second ordre en espace est obtenu avec une méthode de type MUSCL (cf. Godlewski et Raviart [41, p. 299], Toro [93, p. 500]) adaptée comme dans Allaire *et al.* [1]. Il s'agit d'appliquer la méthode classique aux premières quatre composantes et adapter l'approximation de l'équation d'advection.

Partie conservative Pour ce qui est de la partie classique, elle implique la reconstruction des pentes des variables à l'interface et une procédure de correction qui aide le limiteur de pente à garder l'aspect «TVD» du schéma numérique. Les pentes sont reconstruites sur le jeu de variables $\hat{\mathbf{V}} \stackrel{\text{def}}{=} (m_1, m_2, \mathbf{u}, P, z)^t$ avec l'aide d'un limiteur de pente du type «minmod». On note $\hat{\mathbf{W}} \stackrel{\text{def}}{=} (m_1, m_2, \mathbf{u}, P)^t$. Rappelons que la fonction minmod est définie comme

$$\text{minmod}(x, y) = \text{sgn}(x) \max \left\{ 0, \min(|x|, y \text{sgn}(x)) \right\}.$$

Soit a une des composantes de $\hat{\mathbf{W}}$, alors, en notant

$$\begin{cases} \overline{\Delta a}_{i+1/2} \stackrel{\text{def}}{=} \text{minmod}(\Delta a_{i+1/2}, \Delta a_{i-1/2}), \\ \underline{\Delta a}_{i+1/2} \stackrel{\text{def}}{=} \text{minmod}(\Delta a_{i+1/2}, \Delta a_{i+3/2}), \end{cases}$$

l'extension au second ordre en espace s'écrit

$$\begin{cases} a_{i+1/2}^R = a_{i+1} - \frac{1}{2} \overline{\Delta a}_{i+3/2}, \\ a_{i+1/2}^L = a_i + \frac{1}{2} \underline{\Delta a}_{i+1/2}, \end{cases}$$

avec

$$\overline{\Delta a}_{i+1/2} = \underline{\Delta a}_{i-1/2}.$$

En utilisant cette reconstruction sur chaque composante des variables primitives $\hat{\mathbf{W}}$, on peut déduire les quantités reconstruites $\hat{\mathbf{W}}_i^{R,L}$ dans chaque face de la maille i et le schéma s'écrit

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{W}}_i^{n+1/s} = \hat{\mathbf{W}}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathbf{G}_{i+1/2}^n - \mathbf{G}_{i-1/2}^n \right), \\ \mathbf{G}_{i+1/2}^n = \mathbf{G}(\hat{\mathbf{V}}_i^n, \hat{\mathbf{V}}_{i+1}^n), \end{cases}$$

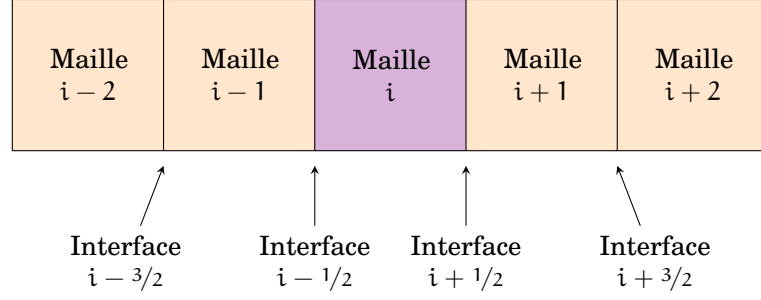


FIG. 9.3.: Reconstruction des pentes

où $\mathbf{G}(\cdot, \cdot)$ est défini comme dans la relation (9.10) (voir figure 9.3).

Variable non conservative En ce qui concerne l'équation d'advection sur z , Kokh [60] a proposé deux schémas. Celui retenu ici est une extension classique au second ordre du schéma upwind qui s'écrit

$$z_i^{n+1/8} = z_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (q_{i+1/2} - q_{i-1/2}) + \frac{\Delta t}{\Delta x} z_i^n (r_{i+1/2} - r_{i-1/2}),$$

avec

$$\begin{cases} q_{i+1/2} & \stackrel{\text{def}}{=} q(\mathbf{V}_{i+1/2}^L, \mathbf{V}_{i-1/2}^R), \\ q(\mathbf{V}_L, \mathbf{V}_R) & \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} (u_R z_R + u_L z_L) - \frac{1}{2} \left| \frac{u_L + u_R}{2} \right| (z_R - z_L), \\ r_{i+1/2} & \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} (u_{i+1/2}^R + u_{i+1/2}^L). \end{cases}$$

Enfin on calcule les variables conservatives $\mathbf{V}_i^{n+1/8}$ à partir des variables primitives $\hat{\mathbf{V}}_i^{n+1/8}$.

Extension au second ordre en temps Dans Allaire *et al.* [1] l'extension au second ordre en temps est obtenue en utilisant une méthode de Runge-Kutta appliquée à l'intégralité du système à cinq équations.

Notons \mathbf{V}^n le vecteur des variables $(m_1, m_2, \rho u, \rho e, z)$ à l'instant $t = t^n$. Indiquons par $\mathbf{L}(\mathbf{V})$ l'opérateur discret associé au solveur du premier ordre en temps de façon à ce que l'algorithme précédent puisse s'écrire globalement comme

$$\mathbf{V}^{n+1/8} = \mathbf{V}^n + \Delta t \mathbf{L}(\mathbf{V}^n).$$

Avec cette notation, la méthode de Runge-Kutta du second ordre est simplement

$$\begin{aligned} \mathbf{V}^{n+1/16} &= \mathbf{V}^n + \Delta t \mathbf{L}(\mathbf{V}^n), \\ \mathbf{V}^{n+1/8} &= \frac{\mathbf{V}^n + \mathbf{V}^{n+1/16}}{2} + \frac{\Delta t}{2} \mathbf{L}(\mathbf{V}^{n+1/16}). \end{aligned}$$

Extension au cas 2D Supposons que la grille utilisée soit cartésienne. En deux dimensions d'espace le système (9.6) s'écrit alors de la façon suivante

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{G}^x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}^y}{\partial y} = \mathbf{0}, \\ \frac{\partial z}{\partial t} + u_x \frac{\partial z}{\partial x} + u_y \frac{\partial z}{\partial y} = 0, \end{cases}$$

où \mathbf{W} est le vecteur constitué par les cinq premières composantes du vecteur $\mathbf{V} \stackrel{\text{def}}{=} (m_1, m_2, \rho u_x, \rho u_y, \rho e, z)$, u_x et u_y indiquent respectivement les vitesses de l'écoulement dans les directions x et y et les flux \mathbf{G}^x et \mathbf{G}^y sont définis par

$$\mathbf{G}^x(\mathbf{V}) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} m_1 u_x \\ m_2 u_x \\ \rho u_x^2 + P \\ \rho u_x u_y \\ (\rho e + P) u_x \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{G}^y(\mathbf{V}) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} m_1 u_y \\ m_2 u_y \\ \rho u_x u_y \\ \rho u_y^2 + P \\ (\rho e + P) u_y \end{pmatrix}.$$

Si on note A_{roe}^x et A_{roe}^y les matrices de Roe associées respectivement aux flux \mathbf{G}^x et \mathbf{G}^y et si on note Δx et Δy les pas d'espace respectivement dans les directions x et y , le flux numérique $(\mathbf{G}^x)_{i+1/2,j}^n$ entre la maille (i, j) et la maille $(i+1, j)$ et le flux numérique $(\mathbf{G}^y)_{i,j+1/2}^n$ entre la maille (i, j) et la maille $(i, j+1)$ à l'instant t^n s'écrivent

$$(\mathbf{G}^x)_{i+1/2,j}^n = \mathbf{R}^x(\mathbf{V}_{i,j}^n, \mathbf{V}_{i+1,j}^n), \quad (\mathbf{G}^y)_{i,j+1/2}^n = \mathbf{R}^y(\mathbf{V}_{i,j}^n, \mathbf{V}_{i,j+1}^n),$$

où

$$\begin{cases} \mathbf{R}^x(\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2) = \frac{1}{2} \left(\mathbf{G}^x(\mathbf{V}_1) + \mathbf{G}^x(\mathbf{V}_2) - |A_{\text{roe}}^x(\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2)| (\mathbf{V}_2 - \mathbf{V}_1) \right), \\ \mathbf{R}^y(\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2) = \frac{1}{2} \left(\mathbf{G}^y(\mathbf{V}_1) + \mathbf{G}^y(\mathbf{V}_2) - |A_{\text{roe}}^y(\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2)| (\mathbf{V}_2 - \mathbf{V}_1) \right). \end{cases}$$

Le passage de l'instant t^n à l'instant $t^{n+1/8}$ s'écrit donc

$$\mathbf{W}_{i,j}^{n+1/8} = \mathbf{W}_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left((\mathbf{G}^x)_{i+1/2,j}^n - (\mathbf{G}^x)_{i-1/2,j}^n \right) - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left((\mathbf{G}^y)_{i,j+1/2}^n - (\mathbf{G}^y)_{i,j-1/2}^n \right),$$

pour les variables conservatives et

$$\begin{aligned} z_{i,j}^{n+1/8} = z_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left\{ [(u_x)_{i,j}^n - |(u_x)_{i,j}^n|] \Delta z_{i+1/2,j} + [(u_x)_{i,j}^n + |(u_x)_{i,j}^n|] \Delta z_{i-1/2,j} \right\} - \\ - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \left\{ [(u_y)_{i,j}^n - |(u_y)_{i,j}^n|] \Delta z_{i,j+1/2} + [(u_y)_{i,j}^n + |(u_y)_{i,j}^n|] \Delta z_{i,j-1/2} \right\}, \end{aligned}$$

pour la variable z .

★ **REMARQUE 9.2.** Pour les démonstrations de toutes ces formules on renvoie à Allaire *et al.* [1], Kokh [60]. ❀

★ **REMARQUE 9.3.** Du fait que la vitesse du son est plus petite dans un mélange que dans une phase pure (ceci quelque soit le mélange, à l'équilibre ou pas), il est impor-

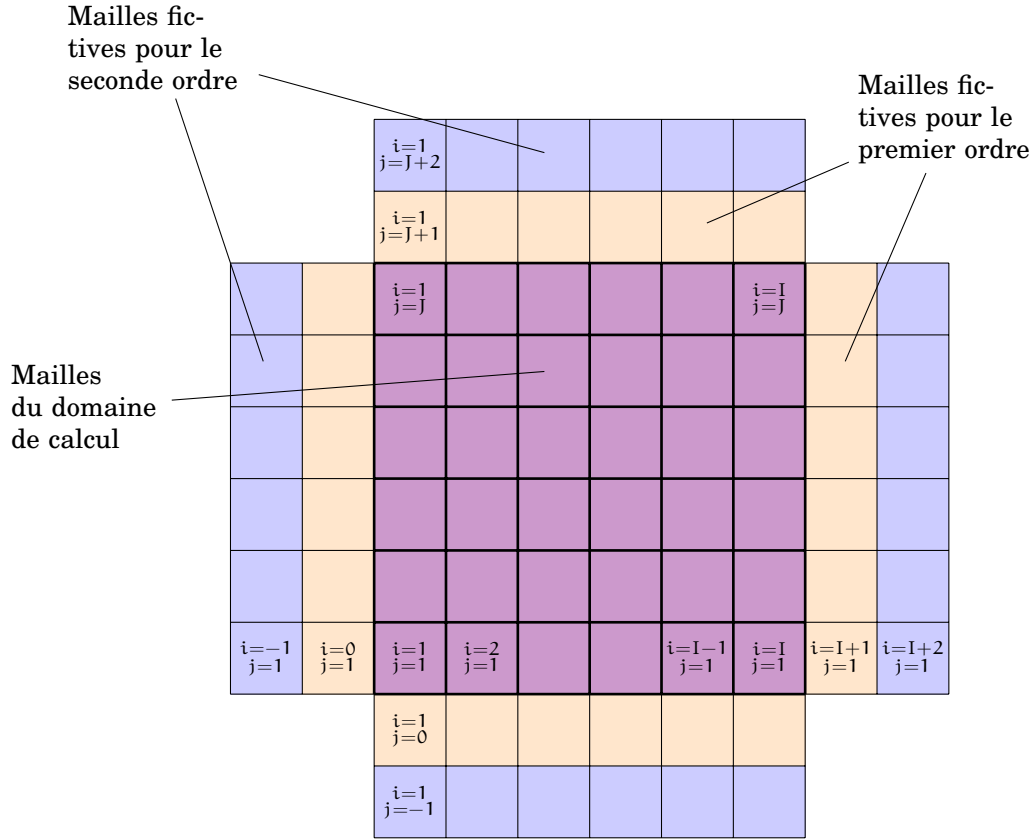


FIG. 9.4.: Numérotation des mailles pour les conditions aux limites : premier et deuxième ordre

tant d'utiliser des schémas numériques qui ne produisent pas trop de diffusion lors de l'étape convective. De ce point de vue, un schéma qui serait intéressant d'utiliser à la place du schéma ci-dessous présenté est une adaptation au cas du système à cinq équations avec fermeture isotherme du schéma antidiffusif de Kokh et Lagoutière [61] écrit pour le système à cinq équations avec fermeture isobare. ❀

Conditions au bord

La question des conditions au bord est en général très vaste et complexe, que ce soit d'un point de vue théorique ou numérique. Ici on décrit juste «algorithmiquement» les cinq types de conditions au bord prises en compte lors de nos simulations, à savoir des conditions de type constantes, périodique, mur, piston et contact avec la phase liquide à pression et température imposées sur la paroi nord. Pour la notation voir la figure 9.4.

Constante Si à la paroi $X \in \{ \text{est, ouest, nord, sud} \}$ on impose une condition de type constante, alors tous les valeurs dans les mailles fictives adjacentes gardent leur

valeur initiale, soit

$$\begin{aligned}
 \text{si } X = \text{est} \quad & \text{alors } \forall j = 1, \dots, J \quad \mathbf{V}_{0,j}^n = \mathbf{V}_{0,j}^0 & \mathbf{V}_{-1,j}^n = \mathbf{V}_{-1,j}^0 \\
 \text{si } X = \text{ouest} \quad & \text{alors } \forall j = 1, \dots, J \quad \mathbf{V}_{I+1,j}^n = \mathbf{V}_{I+1,j}^0 & \mathbf{V}_{I+2,j}^n = \mathbf{V}_{I+2,j}^0 \\
 \text{si } X = \text{sud} \quad & \text{alors } \forall i = 1, \dots, I \quad \mathbf{V}_{i,0}^n = \mathbf{V}_{i,0}^0 & \mathbf{V}_{i,-1}^n = \mathbf{V}_{i,-1}^0 \\
 \text{si } X = \text{nord} \quad & \text{alors } \forall i = 1, \dots, I \quad \mathbf{V}_{i,J+1}^n = \mathbf{V}_{i,J+1}^0 & \mathbf{V}_{i,J+2}^n = \mathbf{V}_{i,J+2}^0
 \end{aligned}$$

Périodique En utilisant ces conditions, on modélise un écoulement physique dont le domaine d'existence est infini. Si aux parois $X \in \{\text{est/ouest, nord/sud}\}$ on impose une condition périodique, alors les mailles fictives sont remplies comme suit

$$\begin{aligned}
 \text{si } X = \text{est/ouest} \quad & \text{alors } \forall j = 1, \dots, J \quad \begin{cases} \mathbf{V}_{0,j}^n = \mathbf{V}_{I,j}^n & \mathbf{V}_{-1,j}^n = \mathbf{V}_{I-1,j}^n \\ \mathbf{V}_{I+1,j}^n = \mathbf{V}_{1,j}^n & \mathbf{V}_{I+2,j}^n = \mathbf{V}_{2,j}^n \end{cases} \\
 \text{si } X = \text{sud/nord} \quad & \text{alors } \forall i = 1, \dots, I \quad \begin{cases} \mathbf{V}_{i,0}^n = \mathbf{V}_{i,J}^n & \mathbf{V}_{i,-1}^n = \mathbf{V}_{i,J-1}^n \\ \mathbf{V}_{i,J+1}^n = \mathbf{V}_{i,1}^n & \mathbf{V}_{i,J+2}^n = \mathbf{V}_{i,2}^n \end{cases}
 \end{aligned}$$

Mur Si la paroi $X \in \{\text{est, ouest, nord, sud}\}$ est un mur, d'abord on remplit les mailles fictives selon la règle

$$\begin{aligned}
 \text{si } X = \text{est} \quad & \text{alors } \forall j = 1, \dots, J \quad \mathbf{V}_{0,j}^n = \mathbf{V}_{1,j}^n & \mathbf{V}_{-1,j}^n = \mathbf{V}_{2,j}^n \\
 \text{si } X = \text{ouest} \quad & \text{alors } \forall j = 1, \dots, J \quad \mathbf{V}_{I+1,j}^n = \mathbf{V}_{I,j}^n & \mathbf{V}_{I+2,j}^n = \mathbf{V}_{I-1,j}^n \\
 \text{si } X = \text{sud} \quad & \text{alors } \forall i = 1, \dots, I \quad \mathbf{V}_{i,0}^n = \mathbf{V}_{i,1}^n & \mathbf{V}_{i,-1}^n = \mathbf{V}_{i,2}^n \\
 \text{si } X = \text{nord} \quad & \text{alors } \forall i = 1, \dots, I \quad \mathbf{V}_{i,J+1}^n = \mathbf{V}_{i,J}^n & \mathbf{V}_{i,J+2}^n = \mathbf{V}_{i,J-1}^n
 \end{aligned}$$

Ensuite, on met à jour les vitesses dans la direction orthogonale à la paroi X :

$$\begin{aligned}
 \text{si } X = \text{est} \quad & \text{alors } \forall j = 1, \dots, J \quad (u_x)_{0,j}^n = -(u_x)_{1,j}^n & (u_x)_{-1,j}^n = -(u_x)_{2,j}^n \\
 \text{si } X = \text{ouest} \quad & \text{alors } \forall j = 1, \dots, J \quad (u_x)_{I+1,j}^n = -(u_x)_{I,j}^n & (u_x)_{I+2,j}^n = -(u_x)_{I-1,j}^n \\
 \text{si } X = \text{sud} \quad & \text{alors } \forall i = 1, \dots, I \quad (u_y)_{i,0}^n = -(u_y)_{i,1}^n & (u_y)_{i,-1}^n = -(u_y)_{i,2}^n \\
 \text{si } X = \text{nord} \quad & \text{alors } \forall i = 1, \dots, I \quad (u_y)_{i,J+1}^n = -(u_y)_{i,J}^n & (u_y)_{i,J+2}^n = -(u_y)_{i,J-1}^n
 \end{aligned}$$

Piston Si on a un piston sur la paroi $X \in \{\text{est, ouest, nord, sud}\}$ qui avance à une vitesse u_p constante, d'abord on suppose qu'on a une condition mur et on met à jour les valeurs dans les mailles fictives comme décrit précédemment ; ensuite, on impose la vitesse normale à la paroi en changeant les valeurs dans les mailles fictives par

$$\begin{aligned}
 \text{si } X = \text{est} \quad & \text{alors } \forall j = 1, \dots, J \quad (u_x)_{0,j}^n = u_p & (u_x)_{-1,j}^n = u_p \\
 \text{si } X = \text{ouest} \quad & \text{alors } \forall j = 1, \dots, J \quad (u_x)_{I+1,j}^n = u_p & (u_x)_{I+2,j}^n = u_p \\
 \text{si } X = \text{sud} \quad & \text{alors } \forall i = 1, \dots, I \quad (u_y)_{i,0}^n = u_p & (u_y)_{i,-1}^n = u_p \\
 \text{si } X = \text{nord} \quad & \text{alors } \forall i = 1, \dots, I \quad (u_y)_{i,J+1}^n = u_p & (u_y)_{i,J+2}^n = u_p
 \end{aligned}$$

Liquide à pression et température imposées sur la paroi nord Si on impose une valeur de la pression $P = P^{\text{ref}}$ et de la température $T = T^{\text{ref}}$ sur la paroi $X = \text{nord}$,

on met à jour les valeurs dans les mailles fictives comme suit :

$$\forall i = -1, \dots, I+2$$

• on pose d'abord

$$\rho_{i,J+1} = \rho^{\text{liq}}(p^{\text{ref}}, T^{\text{ref}}),$$

$$\varepsilon_{i,J+1} = \varepsilon^{\text{liq}}(p^{\text{ref}}, T^{\text{ref}}),$$

• ensuite, puisqu'on a supposé que ces mailles contiennent seulement la phase liquide, on impose

$$(m_1)_{i,J+1} = \rho_{i,J+1},$$

$$(m_2)_{i,J+1} = 0,$$

$$(\rho u_x)_{i,J+1} = (\rho u_x)_{i,J+1},$$

$$(\rho u_y)_{i,J+1} = -(\rho u_y)_{i,J+1},$$

$$(\rho e)_{i,J+1} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{i,J+1} + ((u_x)_{i,J+1}^2 + (u_y)_{i,J+1}^2))\rho_{i,J+1},$$

$$z_{i,J+1} = 1;$$

• enfin on copie ces valeurs dans les autres mailles pour le calcul au deuxième ordre : $\mathbf{W}_{i,J+2} = \mathbf{W}_{i,J+1}$.

Condition CFL

Pour toutes nos simulations le nombre de Courant a été pris égal à 0.5 (sauf si une autre valeur est donnée explicitement). Ceci est réalisé en fixant le pas de temps Δt égal à

$$\frac{1}{2} \frac{\min(\Delta x, \Delta y)}{\max_{1 \leq i \leq I} \left(\max_{1 \leq k \leq 5} |\lambda_k| \right)}$$

où λ_k est la k -ième valeur propre de la matrice jacobienne associée au système (9.6) dans la maille (i, j) donnée.

9.2.2. Étape 1.B : Diffusion de la chaleur

Pendant cette étape on résout le système

$$\begin{cases} \partial_t \rho = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t (\rho e) = -\text{div}(\vartheta \mathbf{grad} T), \\ \partial_t y = 0, \\ \partial_t z = 0, \end{cases}$$

avec, on le rappelle, $\vartheta = z\vartheta_1 + (1 - z)\vartheta_2$. Puisque $\partial_t \rho = 0$, l'équation de conservation d'énergie devient

$$\partial_t \varepsilon = -\frac{1}{\rho} \operatorname{div}(\vartheta \mathbf{grad} T).$$

Par définition $d\varepsilon = c_v dT$ et dans l'interface, pour tout (τ, ε) donné, il existe un et un seul triplet $(y^*, \varepsilon_1^*, \varepsilon_2^*)$ tel que $\varepsilon = y^* \varepsilon_1^* + (1 - y^*) \varepsilon_2^*$. Donc, si on pose

$$c_v = \begin{cases} c_{v_1} & \text{si } y^* = 0, \\ y^* c_{v_1} + (1 - y^*) c_{v_2} & \text{si } 0 < y^* < 1, \\ c_{v_2} & \text{si } y^* = 1, \end{cases}$$

on obtient finalement l'équation

$$\partial_t T = -\frac{1}{\rho c_v} \operatorname{div}(\vartheta \mathbf{grad} T).$$

Résolution numérique Pour ne pas alourdir la notation on indique par n et $n + 1$ les états aux instants respectivement $n + 1/s$ et $n + 2/s$.

On veut calculer la valeur approchée de la solution en les $I \cdot J$ mailles du domaine à l'instant t^n . On a évidemment

$$\begin{pmatrix} \rho \\ u \\ z \\ y \end{pmatrix}_{i,j}^{n+1} = \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ z \\ y \end{pmatrix}_{i,j}^n$$

et on suppose

$$\begin{pmatrix} c_{v_\alpha} \\ \vartheta_\alpha \end{pmatrix}_{i,j}^{n+1} = \begin{pmatrix} c_{v_\alpha} \\ \vartheta_\alpha \end{pmatrix}_{i,j}^n.$$

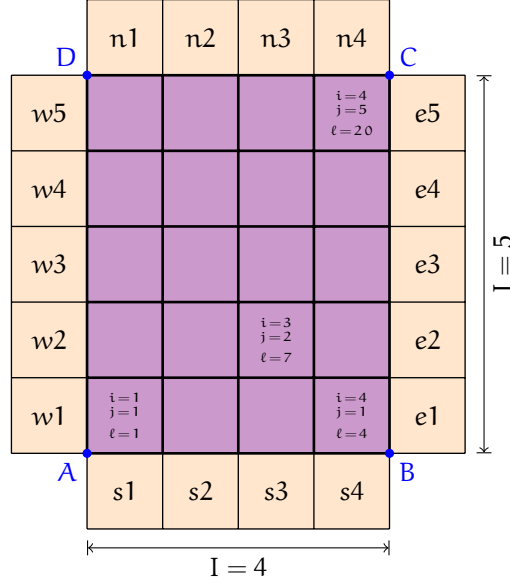
Il reste à résoudre l'EDP sur la température

$$\partial_t T = -\frac{1}{\rho c_v} \operatorname{div}(\vartheta \mathbf{grad} T).$$

Pour cela on utilise une méthode de type «volumes finis» de la même manière que pour la partie convective mais cette fois-ci, pour s'affranchir de la condition de stabilité qui serait extrêmement restrictive sur le pas de temps (en général plus que la condition CFL de l'étape 1.A), on choisit une résolution implicite. De plus, pour limiter la diffusion numérique, on préfère une méthode vraiment 2D plutôt qu'une méthode par directions alternées.

Le schéma s'écrit

$$\frac{(\rho c_v)_{i,j}^n (T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^n)}{\Delta t} = \frac{G_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} - G_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1}}{\Delta x} + \frac{G_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} - G_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta y}$$


 FIG. 9.5.: Discrétisation de ABCD (cas particulier $I = 4$, $J = 5$)

où le flux numérique $G_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1}$ entre la maille (i, j) et la maille $(i+1, j)$ est

$$G_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} \stackrel{\text{def}}{=} \vartheta_{i+1/2,j}^n \frac{T_{i+1,j}^{n+1} - T_{i,j}^{n+1}}{\Delta x},$$

avec $\vartheta_{i+1/2,j}^n$ la moyenne harmonique des $\vartheta_{i,j}^n$ et $\vartheta_{i+1,j}^n$, à savoir

$$\vartheta_{i+1/2,j}^n \stackrel{\text{def}}{=} 2 \frac{\vartheta_{i,j}^n \vartheta_{i+1,j}^n}{\vartheta_{i,j}^n + \vartheta_{i+1,j}^n}.$$

En utilisant la discrétisation d'Euler implicite pour la température on a donc l'équation

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\Delta t}{\Delta x^2} a_{i,j}^n \vartheta_{i+\frac{1}{2},j}^n \right) T_{i+1,j}^{n+1} + \\ & + \left(-\frac{\Delta t}{\Delta y^2} a_{i,j}^n \vartheta_{i,j+\frac{1}{2}}^n \right) T_{i,j+1}^{n+1} + \\ & + \left(1 + \left(\frac{\vartheta_{i+\frac{1}{2},j}^n + \vartheta_{i-\frac{1}{2},j}^n}{\Delta x^2} + \frac{\vartheta_{i,j+\frac{1}{2}}^n + \vartheta_{i,j-\frac{1}{2}}^n}{\Delta y^2} \right) a_{i,j}^n \Delta t \right) T_{i,j}^{n+1} + \\ & + \left(-\frac{\Delta t}{\Delta x^2} a_{i,j}^n \vartheta_{i-\frac{1}{2},j}^n \right) T_{i-1,j}^{n+1} + \\ & + \left(-\frac{\Delta t}{\Delta y^2} a_{i,j}^n \vartheta_{i,j-\frac{1}{2}}^n \right) T_{i,j-1}^{n+1} = T_{i,j}^n \end{aligned}$$

où on a indiqué $a_{ij}^n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\rho_{ij}^n (c_v)_{ij}^n}$. Il s'agit d'une équation de la forme

$$b_{i+1,j}^n T_{i+1,j}^{n+1} + c_{i,j+1}^n T_{i,j+1}^{n+1} + d_{i,j}^n T_{i,j}^{n+1} + f_{i-1,j}^n T_{i-1,j}^{n+1} + g_{i,j-1}^n T_{i,j-1}^{n+1} = T_{i,j}^n.$$

On choisit une numérotation des mailles qui fait intervenir un unique indice $\ell \in$

$\{1, \dots, I \cdot J\}$ en posant

$$\ell \stackrel{\text{def}}{=} (j-1) \cdot I + i$$

(voir la figure 9.5 à la page précédente pour une illustration dans le cas $I = 4, J = 5$). Pour réécrire cette équation par rapport à l'indice ℓ , on observe d'abord que

$$v_{i,j} = v_\ell, \quad v_{i\pm 1,j} = v_{\ell\pm 1}, \quad v_{i,j\pm 1} = v_{\ell\pm I}.$$

Il vient que si ℓ n'admet pas de mailles voisines du bord, l'équation exprimée à la maille d'indice ℓ devient

$$b_{\ell+1}^n T_{\ell+1}^{n+1} + c_{\ell+I}^n T_{\ell+I}^{n+1} + d_\ell^n T_\ell^{n+1} + f_{\ell-1}^n T_{\ell-1}^{n+1} + g_{\ell-I}^n T_{\ell-I}^{n+1} = T_\ell^n.$$

Finalement on obtient un système linéaire $A^n \mathbf{T}^{n+1} = \mathbf{T}^n$ où la matrice $A^n \in \mathcal{M}_{I \cdot J}(\mathbb{R})$ a la structure suivante :

$$A^n = \begin{pmatrix} \boxed{D_1^n} & \boxed{C_1^n} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \boxed{G_2^n} & \boxed{D_2^n} & \boxed{C_2^n} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \boxed{G_k^n} & \boxed{D_k^n} & \boxed{C_k^n} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \boxed{G_{J-1}^n} & \boxed{D_{J-1}^n} & \boxed{C_{J-1}^n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \boxed{G_J^n} & \boxed{D_J^n} \end{pmatrix}.$$

Comme indiqué au moyen des lignes dans le profil de la matrice, on voit que A^n admet une structure tridiagonale par blocs où les matrices carrées C_k^n, D_k^n et $G_k^n \in \mathcal{M}_I(\mathbb{R})$, $k = 1, \dots, J$ s'écrivent

$$C_k^n = \begin{pmatrix} c_{k \cdot I}^n & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_{(k+1) \cdot I}^n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{(k+J-1) \cdot I}^n \end{pmatrix},$$

$$G_{k+1}^n = \begin{pmatrix} g_{k \cdot I}^n & 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_{(k+1) \cdot I}^n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g_{(k+J-1) \cdot I}^n \end{pmatrix},$$

$$D_k^n = \begin{pmatrix} d_{k \cdot I}^n & b^n & 0 & 0 \\ f^n & d_{(k+1) \cdot I}^n & b^n & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & f^n & d_{(k+J-1) \cdot I}^n \end{pmatrix}.$$

Ensuite on récupère les informations dans la maille (i, j) avec les relations

$$j = \left\lfloor \frac{\ell - 1}{I} \right\rfloor + 1,$$

$$i = ((\ell - 1) \bmod I) + 1,$$

ayant indiqué par $[\star]$ la partie entière de \star . Enfin, pouvant exprimer l'énergie interne ε en fonction de la pression et de la température, on pose $\varepsilon_{i,j}^{n+2/8} = \varepsilon(p_{i,j}^{n+1/8}, T_{i,j}^{n+2/8})$.

Dans nos cas tests, la résolution du système linéaire, qui est coûteuse et doit être effectuée à chaque pas de temps, est réalisée à l'aide de la librairie PETSC (*Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation*) : pour une matrice tridiagonale par blocs elle utilise une méthode itérative de type GMRES avec restart. Pour plus de détails sur cette librairie on pourra consulter Balay *et al.* [5; 6; 7].

Conditions aux bords

Des conditions aux limites doivent être ajoutées pour les mailles qui admettent un voisin sur le bord du domaine ABCD. Ce sera le cas si

$$\ell = \begin{cases} p, & p = 1, \dots, I \quad (\text{mailles en contact avec le segment [AB]}), \\ (J-1) \cdot I + p, & p = 1, \dots, I \quad (\text{mailles en contact avec le segment [CD]}), \\ p \cdot I, & p = 1, \dots, J \quad (\text{mailles en contact avec le segment [BC]}), \\ (p-1) \cdot I + 1, & p = 1, \dots, J \quad (\text{mailles en contact avec le segment [AD]}). \end{cases}$$

Lors de nos simulations on prend en considération seulement deux types de bord : des conditions de paroi isotherme (et donc de type Dirichlet) où on impose que la température au bord du domaine doit être égale à la température de la paroi (qui en toute généralité est une fonction qui peut varier en temps et/ou en espace) et des conditions de type Neumann homogène où on impose un flux de chaleur nul.

Conditions Dirichlet Numériquement, si on indique avec $T^{d_1 d_2}$ les données Dirichlet aux mailles voisines des segments [AB], [BC], [CD] et [AD], avec $d_1 = n, s, e, w$ et $d_2 = 1, \dots, I$ si $d_1 = n, s$, $d_2 = 1, \dots, J$ si $d_1 = e, w$, l'action des conditions au bord est prise en compte en modifiant le second membre, autrement dit on résout le système linéaire $A^n \mathbf{T}^{n+1} = \mathbf{T}^n + \mathbf{v}$ où \mathbf{v} est construit comme suit :

- ☛ d'abord on pose $\mathbf{v} = \mathbf{0}$,
- ☛ ensuite, pour $\ell = p$ avec $p = 1, \dots, I$, on pose $v_\ell = v_\ell + \frac{(T)^{sp}}{(\Delta x)^2}$,
- ☛ pour $\ell = (J-1) \cdot I + p$ avec $p = 1, \dots, I$, on pose $v_\ell = v_\ell + \frac{(T)^{np}}{(\Delta x)^2}$,
- ☛ pour $\ell = p \cdot I$ avec $p = 1, \dots, J$, on pose $v_\ell = v_\ell + \frac{(T)^{ep}}{(\Delta y)^2}$,
- ☛ enfin, pour $\ell = (p-1) \cdot I + 1$ avec $p = 1, \dots, J$, on pose $v_\ell = v_\ell + \frac{(T)^{wp}}{(\Delta y)^2}$.

Conditions Neumann En général, l'action des conditions au bord de type Neumann est prise en compte en modifiant la matrice du système linéaire. Autrement dit, il faut résoudre le système linéaire $(A + B)^n \mathbf{T}^{n+1} = \mathbf{T}^n$ où la matrice B prend en compte le

flux de chaleur imposé sur les bords. Puisque dans nos tests ce flux est nul, aucune modification n'est à faire.

9.2.3. Étape 1.C : Gravité

Pendant cette étape on considère le système

$$\begin{cases} \partial_t \rho = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) = \rho \mathbf{g}, \\ \partial_t (\rho e) = \rho \mathbf{g} \mathbf{u}, \\ \partial_t y = 0, \\ \partial_t z = 0, \end{cases}$$

avec $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$ et $\mathbf{g} = (0, -\tilde{g})$. Il s'agit donc de résoudre seulement le système d'EDO

$$\begin{cases} \partial_t u_y = -\tilde{g}, \\ \partial_t e = -\tilde{g} u_y. \end{cases}$$

Résolution numérique Bien évidemment

$$\begin{pmatrix} \rho \\ u_x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{i,j}^{n+3/8} = \begin{pmatrix} \rho \\ u_x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{i,j}^{n+2/8}.$$

La vitesse verticale et l'énergie sont ensuite mises à jour par un schéma d'Euler explicite selon les relations

$$\begin{cases} (u_y)_{i,j}^{n+3/8} = (u_y)_{i,j}^{n+2/8} - \tilde{g} \Delta t, \\ e_{i,j}^{n+3/8} = e_{i,j}^{n+2/8} - \tilde{g} (u_y)_{i,j}^{n+2/8} \Delta t. \end{cases}$$

★ **REMARQUE 9.4.** Il est bien connu que l'utilisation d'un splitting pour traiter les effets de la gravité peut calculer des solutions affectées par des erreurs très grandes lorsque la gravité est très élevée, comme dans les plasmas par exemple. Une solution pour palier à ce problème consiste en réécrire la force de gravité comme un potentiel, en déduire une forme conservative et utiliser donc un schéma numérique basé sur cette forme (ce qui a été fait par exemple par Gosse [42; 43] ou Mekkas [79]). Néanmoins, dans les simulation qui nous intéressent, la gravité est celle de la Terre et donc ces erreurs sont négligeables. ❀

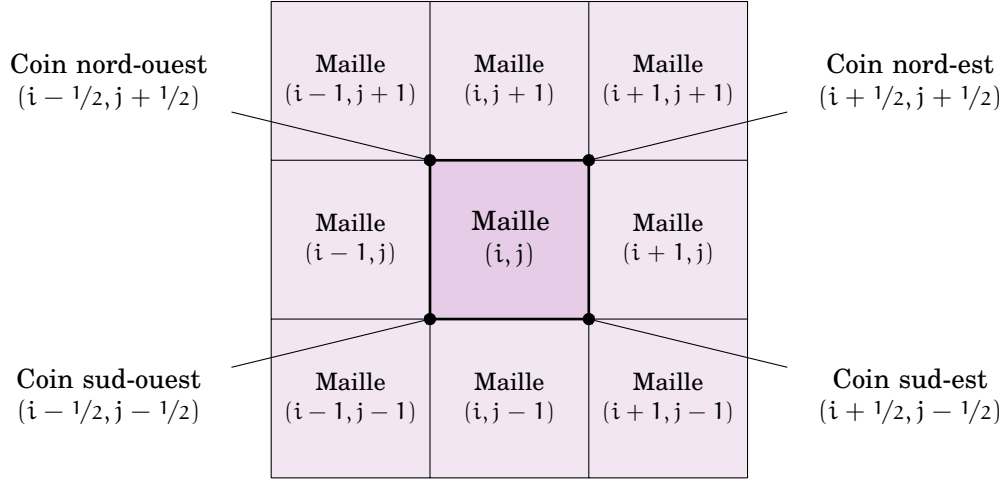


FIG. 9.6.: Notation pour l'approximation de la tension de surface

9.2.4. Étape 1.D : Capillarité

Dans cette étape on résout le système

$$\begin{cases} \partial_t \rho = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) = \mathfrak{T}, \\ \partial_t (\rho e) = \mathfrak{T} \cdot \mathbf{u}, \\ \partial_t y = 0, \\ \partial_t z = 0. \end{cases}$$

Concrètement on résout le système d'EDP

$$\begin{cases} \partial_t (\rho \mathbf{u}) = \mathfrak{T}, \\ \partial_t (\rho e) = \mathfrak{T} \cdot \mathbf{u}, \end{cases}$$

avec

$$\mathfrak{T} \stackrel{\text{def}}{=} -\zeta \operatorname{div} \left(\frac{\mathbf{grad} z \otimes \mathbf{grad} z}{|\mathbf{grad} z|} - |\mathbf{grad} z| \operatorname{Id} \right).$$

Résolution numérique Bien évidemment

$$\begin{pmatrix} \rho \\ y \\ z \end{pmatrix}_{i,j}^{n+3/8} = \begin{pmatrix} \rho \\ y \\ z \end{pmatrix}_{i,j}^{n+2/8}.$$

Il s'agit maintenant de donner la discrétisation retenue pour prendre en compte le terme source de tension de surface. On pose $\mathbf{m} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{grad} z$. Alors la valeur du vecteur \mathbf{m} dans le coin nord-est de la maille (i, j) , c'est-à-dire entre la maille (i, j) et la maille

$(i+1, j+1)$ (voir figure 9.6), est calculée selon la relation

$$\mathbf{m}_{i+1/2, j+1/2} = \begin{pmatrix} \frac{z_{i+1, j} - z_{i, j} + z_{i+1, j+1} - z_{i, j+1}}{2\Delta x} \\ \frac{z_{i, j+1} - z_{i, j} + z_{i+1, j+1} - z_{i+1, j}}{2\Delta y} \end{pmatrix}$$

et la valeur de \mathbf{m} dans la maille (i, j) est une moyenne des valeurs dans les quatre coins de la maille, soit

$$\mathbf{m}_{i, j} = \frac{\mathbf{m}_{i+1/2, j+1/2} + \mathbf{m}_{i+1/2, j-1/2} + \mathbf{m}_{i-1/2, j+1/2} + \mathbf{m}_{i-1/2, j-1/2}}{4}.$$

Notons par $\mathbf{m} = (m^x, m^y)$ les deux composantes du gradient de z . Alors la courbure

$$\mathcal{C} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{|\mathbf{m}|} \left[\underbrace{\left(\frac{\mathbf{m}}{|\mathbf{m}|} \cdot \mathbf{grad} \right) |\mathbf{m}|}_{\mathcal{A}} - \underbrace{\text{div}(\mathbf{m})}_{\mathcal{B}} \right],$$

évaluée dans la maille (i, j) , s'écrit

$$\mathcal{C}_{i, j} = \mathcal{A}_{i, j} + \mathcal{B}_{i, j}$$

avec

$$\mathcal{A}_{i, j} = \frac{m_{i, j}^x}{|m_{i, j}^x|} \frac{\partial |m_{i, j}|}{\partial x} + \frac{m_{i, j}^y}{|m_{i, j}^y|} \frac{\partial |m_{i, j}|}{\partial y}$$

et

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{i, j} &= \frac{\partial m_{i, j}^x}{\partial x} + \frac{\partial m_{i, j}^y}{\partial y} = \\ &= \frac{m_{i+1/2, j+1/2}^x - m_{i-1/2, j+1/2}^x + m_{i+1/2, j-1/2}^x - m_{i-1/2, j-1/2}^x}{2\Delta x} + \\ &+ \frac{m_{i+1/2, j+1/2}^y - m_{i+1/2, j-1/2}^y + m_{i-1/2, j+1/2}^y - m_{i-1/2, j-1/2}^y}{2\Delta y}. \end{aligned}$$

★ **REMARQUE 9.5.** L'un des défauts de cette méthode est qu'elle peut générer des courants parasites au voisinage de l'interface. Il s'agit de vitesses erratiques non physiques qui peuvent induire une instabilité de l'interface. Pour lever cette difficulté il convient de mentionner le travail développé par Jamet *et al.* [57] qui base l'analyse sur une minimisation d'énergie et permet de réduire les courants parasites à la précision machine (remarquons que cette approche est appliquée à la méthode du second gradient) ou encore la thèse de Vigneaux [95] qui introduit une nouvelle condition de stabilité. Pour l'étude d'autres schémas numériques on pourra aussi consulter l'article de Perigaud et Saurel [84] ou les thèses de Chanteperdrix [25] et de Braconnier [18]. ❀

★ **REMARQUE 9.6 (CONDITIONS AUX LIMITES).** Dans le cas d'une maille située au bord du

domaine il faudrait imposer un angle de contact. Du point de vue du schéma numérique, cela signifierait que seuls les valeurs de $m_{i\pm 1/2, j\pm 1/2}^x$ sont imposées à la paroi. Cependant lors des nos simulations cet effet à été négligé. Pour la prise en compte d'une éventuelle loi d'angle de contact (statique ou dynamique) ainsi que la modification des schémas numériques lorsque la tension de surface dépend de la température, on pourra consulter de nouveau la thèse de Chanteperdrix [25]. ❀

9.3. Étape 2 : projection sur la variété d'équilibre

Il s'agit de projeter la solution obtenue à la première étape sur la variété d'équilibre définie par l'entropie $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$ donnée à la définition 2.9 à la page 54. On sait que la construction de cette entropie, qui est basée sur la résolution du système non-linéaire (2.32) à la page 54, est équivalent d'une part au calcul de l'enveloppe concave 3D de la fonction $\max(s_1(\mathbf{w}), s_2(\mathbf{w}))$ et d'autre part au calcul de l'inf-convolution (ou de trois transformées de Legendre-Fenchel) comme on a vu au chapitre 2. Pour le calcul numérique d'une enveloppe concave il existe le célèbre algorithme *QHull*, décrit par exemple dans Barber *et al.* [8], O'Rourke [83]. Pour le calcul d'une inf-convolution, il existe un algorithme plutôt performant qu'on peut trouver dans Corrias [29], Lucet [76; 77] et qui se base sur le calcul de plusieurs transformées de Legendre-Fenchel en 1D.

Cependant, ces deux approches peuvent donner des problèmes de précision à cause de l'incompressibilité de la phase liquide qui rend les deux surfaces entropiques $s_\alpha(\tau, \varepsilon)$ très différentes. Pour cette raison nous calculons l'entropie à l'équilibre comme décrit à la définition 2.9 à la page 54. Pour la résolution du système non-linéaire (2.32), nous avons proposé dans la première partie de la thèse une stratégie qui permet de réduire cette étape à la résolution, à chaque pas de temps et dans chaque maille, d'une simple équation non-linéaire portant sur la température (l'équation de changement de phase donnée à la définition 2.10 à la page 55). Les détails de cette résolution ont été déjà exposés aux chapitres 5 pour les gaz parfaits, 6 pour les *stiffened gas* et 7 pour le cas de lois tabulées issues des mesures expérimentales.

Résolution numérique Premièrement on utilise le fait que

$$\begin{cases} \partial_t \rho = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t (\rho e) = 0, \end{cases}$$

pour définir

$$\begin{pmatrix} \rho \\ \mathbf{u} \\ \varepsilon \end{pmatrix}_{i,j}^{n+1} = \begin{pmatrix} \rho \\ \mathbf{u} \\ \varepsilon \end{pmatrix}_{i,j}^{n+1/2}.$$

Il ne reste plus qu'à définir les densités partielles ρ_α^{n+1} et la fraction volumique z^{n+1} par projection sur l'état d'équilibre isotherme-isobare-equipotentiel en optimisant l'en-

tropie de mélange, soit

$$\begin{pmatrix} z \\ \rho_\alpha \end{pmatrix}_{i,j}^{n+1} = \begin{pmatrix} z \\ \rho_\alpha \end{pmatrix}_{i,j}^*$$

avec $(\rho_\alpha)_{i,j}^* \stackrel{\text{def}}{=} \frac{y_{i,j}^*}{z_{i,j}^*} \rho_{i,j}^{n+1}$ et les fractions $(z, y)_{i,j}^*$ calculés comme à la définition 2.9 à la page 54.

9.4. Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons présenté une stratégie pour l'approximation numérique du modèle de changement de phase, décrit par les équations d'Euler avec la loi d'état d'équilibre, basée sur le sur-système (8.23). Ce système correspond au système à cinq équations avec fermeture isotherme décrit dans Allaire *et al.* [1], Kokh [60] auquel on a ajouté deux paramètres de relaxation.

Avant de passer à l'écriture d'un schéma numérique pour sa résolution, on a tout d'abord modélisé trois autres phénomènes physiques qui jouent un rôle majeur dans les changements de phase par ébullition nucléée : la gravité, la diffusion de la chaleur et la tension de surface.

Une fois le système ainsi établi, on est passé à la description d'un schéma numérique : il s'agit d'un schéma classique de décomposition d'opérateurs connus sous le nom de «schéma de relaxation». Chaque pas de temps est divisé en deux étapes : hydrodynamique sans termes sources, puis relaxation des quantités thermodynamiques en maximisant l'entropie hors équilibre. On a donc détaillé chaque étape de ce schéma :

première étape : elle est elle-même décomposée en plusieurs sous-étapes. D'abord on résout le modèle homogène à cinq équations avec fermeture isotherme, c'est-à-dire sans termes sources, par une méthode de volumes finis où les flux numériques sont calculés à l'aide d'un solveur de Riemann approché de type Roe. Ensuite on prend en compte la gravité, puis la tension de surface et pour terminer la diffusion de la chaleur. En particulier, la diffusion thermique est résolue avec un schéma implicite pour éviter des limitations trop contraignantes sur le pas temporel. Le traitement de la tension de surface a été effectué dans sa formulation CSF : elle apparaît sous la forme d'une force volumique étalée sur l'épaisseur de l'interface ;

seconde étape : on prend en compte les termes sources de changement de phase en projetant la solution sur la variété d'équilibre thermodynamique. Autrement dit, connaissant les variables thermodynamiques phasiques, on maximise l'entropie hors équilibre et on obtient ainsi de nouvelles valeurs des concentrations phasiques. Cette étape est basée sur l'optimisation de l'entropie et, comme on a vu dans la première partie de la thèse, elle peut être résolue avec des lois d'état quelconques, même seulement tabulées.

CHAPITRE 10

Simulations numériques

10.1 Simulations numériques unidimensionnelles	282
10.1.1 Advection d'une interface entre phases pures à l'équilibre	282
10.1.2 Changement de phase par compression	288
10.1.3 Compression d'une bulle unidimensionnelle de vapeur	297
10.2 Simulations numériques bidimensionnelles	304
10.2.1 Compression d'une bulle de vapeur	304
10.2.2 Compression de quatre bulles de vapeur	309
10.2.3 Dépression de neuf bulles de vapeur	313
10.2.4 Surchauffage d'une bulle de vapeur dans du liquide	316
10.2.5 Nucléation d'une bulle de vapeur à contact d'une paroi chauffée	322
10.2.6 Nucléation de bulles de vapeur à contact d'une paroi chauffée	331
10.2.7 Création d'un film de vapeur	345
10.3 Conclusion.	359

Résumé

DANS CE CHAPITRE nous allons présenter les différents cas tests utilisés pour s'assurer du bon comportement du schéma numérique employé.

On s'intéresse tout d'abord à la validation de cette méthode numérique sur quelques cas tests unidimensionnels. Ce schéma est ensuite appliqué à la simulation des écoulements liquide-vapeur en 2D. On n'envisage que des maillages cartésiens réguliers. Les deux phases sont par ailleurs décrites par les lois d'état de type Stiffened Gas du chapitre 6 avec les paramètres et la loi de changement de phase calculés soit pour l'eau soit pour le fluide de l'exemple 2 à la page 169. Toutes les simulations de ce chapitre ont été également réalisées avec des gaz parfaits mais on ne reporte pas ici les résultats pour ne pas être redondants.

S'il n'est pas dit explicitement, tous nos simulations ont été effectuées avec le schéma au premier ordre en temps et en espace avec la condition CFL de la page 270.

10.1. Simulations numériques unidimensionnelles

Dans ce paragraphe, nous présentons des résultats de simulations numériques unidimensionnelles de phénomènes de changement de phase.

10.1.1. Advection d'une interface entre phases pures à l'équilibre

Le premier test est une validation de la consistance de la méthode.

On considère un problème unidimensionnel d'advection d'une interface : un domaine de 1 m de long contient de l'eau à l'état liquide et de la vapeur d'eau initialement séparés par une interface située à $x_{\text{int}} = 0.5$ m (voir la figure 10.1 à la page ci-contre).




On suppose que les deux phases suivent des lois d'état de type *stiffened gas*. Les caractéristiques des deux phases sont ces données dans le tableau 6.3 à la page 176 et la loi de changement de phase est calculée avec la pression à saturation donnée à la remarque 6.3 à la page 180. Le fluide à gauche de l'interface correspond à de l'eau à l'état liquide tandis que le fluide à droite correspond à de la vapeur d'eau.

La température initiale des deux phases est supposée égale à $T_{t=0} = 500$ K. La vitesse des deux phases est initialement de $u = 100$ m/s. Les densités et la pression sont choisies de part et d'autre de l'interface de telle sorte qu'on est à saturation dans tout le domaine, ainsi $\rho = \rho_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_{t=0}) \approx 817.8534$ kg/m³ à gauche de l'interface, $\rho = \rho_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_{t=0}) \approx 11.7832$ kg/m³ à droite de l'interface et $P = P^{\text{sat}}(T_{t=0}) \approx 2.6351 \times 10^6$ Pa partout.

Les conditions aux limites sont des états constants aux deux extrémités du domaine qui est discrétisé avec 500 mailles. Le temps varie de $t = 0$ ms à $t = 4$ ms et on néglige tout effet dissipatif.

Résultats et discussion

Le problème ainsi proposé ne fait pas intervenir de changement de phase mais donne la possibilité de voir comment se comportent les termes sources dans cette circonstance. Notamment, il permet de constater que le schéma décrit au chapitre 9 capture la bonne solution en ne faisant pas intervenir de changement de phase mais seulement des effets dynamiques malgré la présence des termes sources de relaxation ; voir à ce propos les figures 10.2-10.3 où on a comparé la solution obtenue sans les termes de changement de phase avec celle obtenue en présence des termes de changement de phase avec la notation suivante :

-  $t = 0.0$ ms
-  $t = 1.3$ ms
-  $t = 2.6$ ms

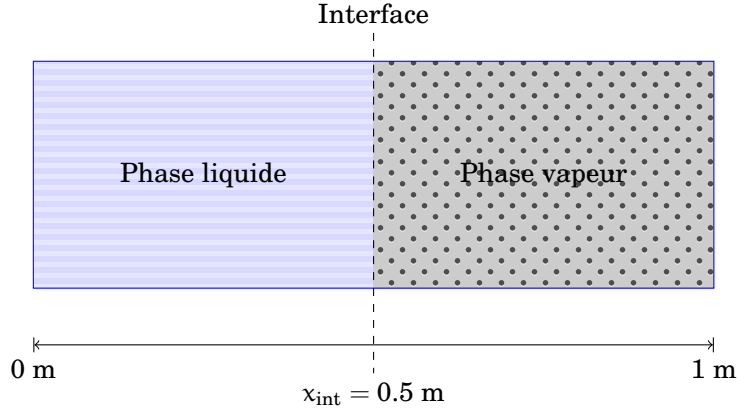


FIG. 10.1.: Géométrie du cas test 10.1.1

□ $t = 4.0 \text{ ms}$

Par ailleurs, la solution numérique obtenue coïncide avec la solution exacte qui est donnée par

$$(\rho_1 z, \rho_2(1-z), \rho u, \rho e, z)^t(x, t) = \begin{cases} (\rho_1 z, \rho_2(1-z), \rho u, \rho e, z)_L^t & \text{si } x < 100t, \\ (\rho_1 z, \rho_2(1-z), \rho u, \rho e, z)_R^t & \text{si } x > 100t, \end{cases}$$

où $(\rho_1 z, \rho_2(1-z), \rho u, \rho e, z)_L^t$ désigne l'état constant à gauche de l'interface et $(\rho_1 z, \rho_2(1-z), \rho u, \rho e, z)_R^t$ l'état constant à droite. Ainsi, malgré les termes sources de changement de phase, nous obtenons la même vitesse de propagation qui est celle de la solution exacte.

Intéressons nous à présent au profil de la pression. On remarque que, si le schéma semble ne pas engendrer d'oscillations de pression lorsque on ne prend pas en compte le changement de phase, en revanche l'ajout du changement de phase introduit des oscillations (qui toutefois semblent n'avoir aucune conséquence sur les autres variables). Pour mieux analyser l'ampleur de ces oscillations on a représenté à la figure 10.4 à la page 287 l'évolution temporelle de la pression avec changement de phase. On remarque que l'erreur commise sur la pression est inférieure à 5 Pa. Ce résultat est en accord avec les majorations qu'on avait données à la remarque 6.3 à la page 180 : en utilisant la pression à saturation de cette remarque, l'erreur commise sur la température est toujours inférieure à $1.2 \times 10^{-3} \text{ K}$ mais le caractère presque incompressible de la phase liquide fait que cette erreur est amplifiée lors du calcul de la pression.

Ceci est en accord avec la simulation numérique du même cas test mais effectuée avec deux lois d'état de type gaz parfaits. Avec ces lois il n'y a aucune oscillation visible. On pense que cette différence de comportement est due à deux facteurs. D'une part le calcul de la pression de saturation est presque analytique dans le sens que, la fonction décrivant la courbe de coexistence étant explicite, il s'agit de résoudre une seule équation non-linéaire sur la température avec une précision arbitraire, alors qu'avec deux lois *stiffened gas* la fonction qui décrit la courbe de coexistence a été calculée avec une

approximation au sens des moindres carrés et donc, bien que l'erreur introduite lors de la résolution de l'équation non-linéaire puisse être contrôlée, le calcul de la pression en fonction de la température est toujours affecté par l'erreur d'approximation au sens des moindres carrés. D'autre part, toute erreur commise sur la température lors de la résolution de l'équation non-linéaire ne va pas être amplifiée sur la pression puisque les gaz parfaits sont très compressibles.

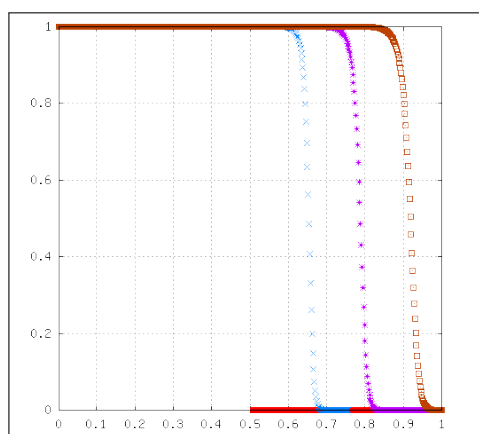
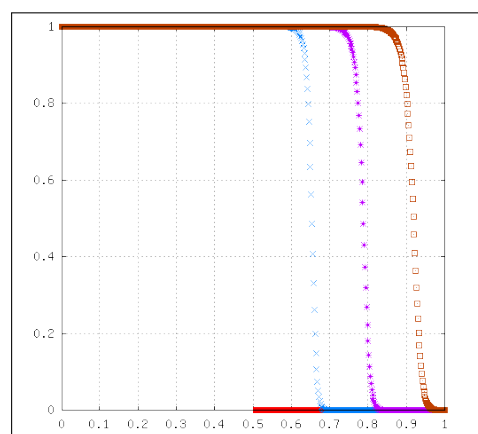
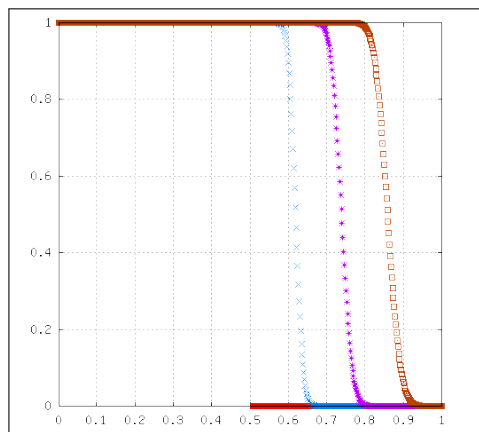
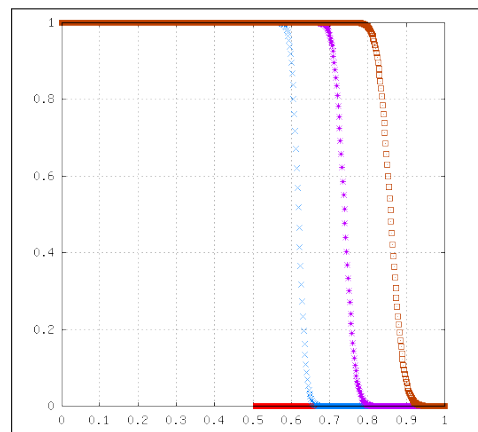
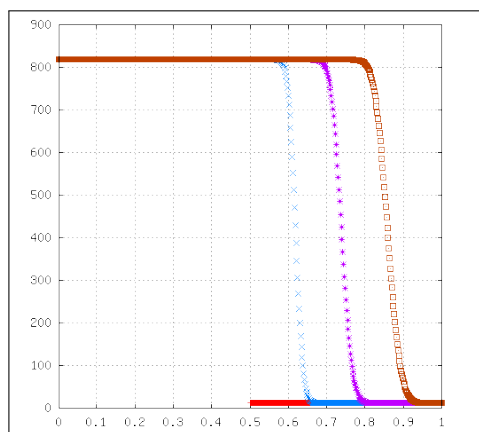
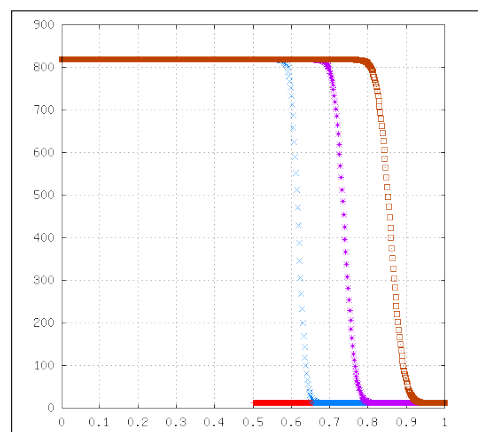
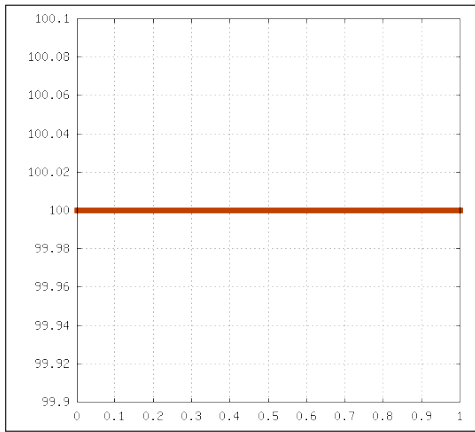
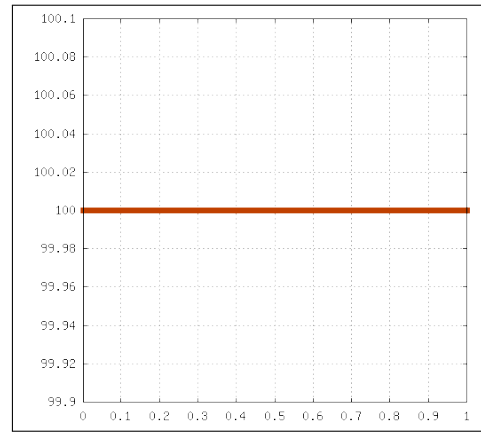

 (a) Évolution en temps de la fraction de masse y sans changement de phase

 (b) Évolution en temps de la fraction de masse y avec changement de phase

 (c) Évolution en temps de la fraction de volume z sans changement de phase

 (d) Évolution en temps de la fraction de volume z avec changement de phase

 (e) Évolution en temps de la densité ρ sans changement de phase

 (f) Évolution en temps de la densité ρ avec changement de phase

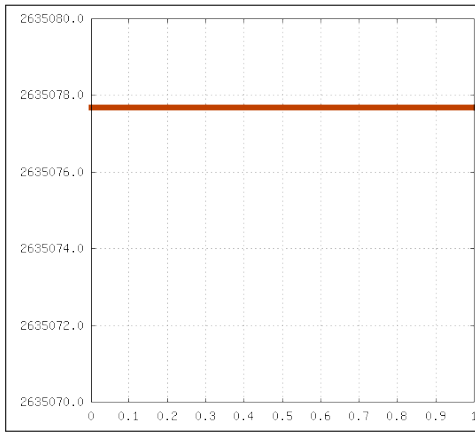
FIG. 10.2.: Évolution en temps de la solution du cas test 10.1.1 sans et avec changement de phase



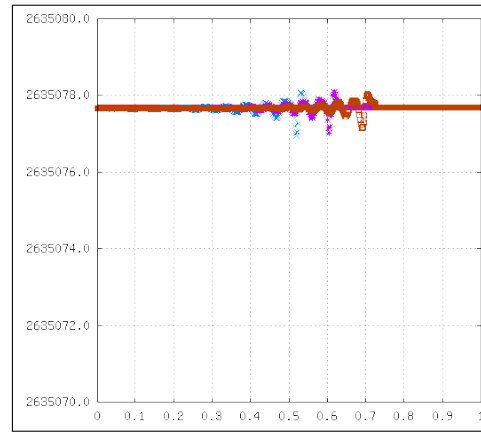
(a) Évolution en temps de la vitesse u sans changement de phase



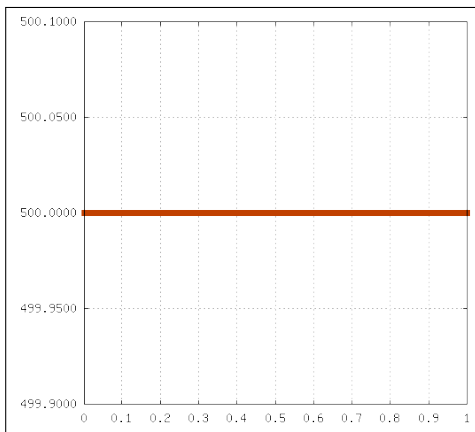
(b) Évolution en temps de la vitesse u avec changement de phase



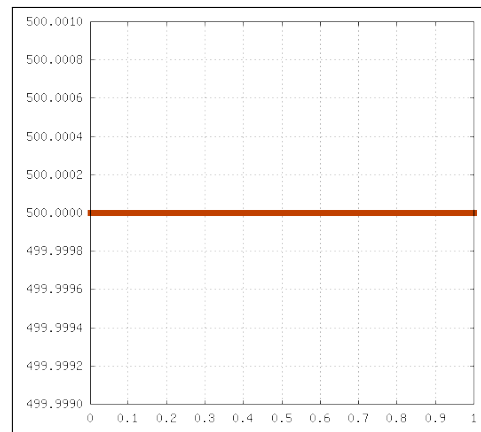
(c) Évolution en temps de la pression P sans changement de phase



(d) Évolution en temps de la pression P avec changement de phase (voir la figure 10.4 à la page ci-contre)



(e) Évolution en temps de la température T sans changement de phase



(f) Évolution en temps de la température T avec changement de phase

FIG. 10.3.: Évolution en temps de la solution du cas test 10.1.1 sans et avec changement de phase

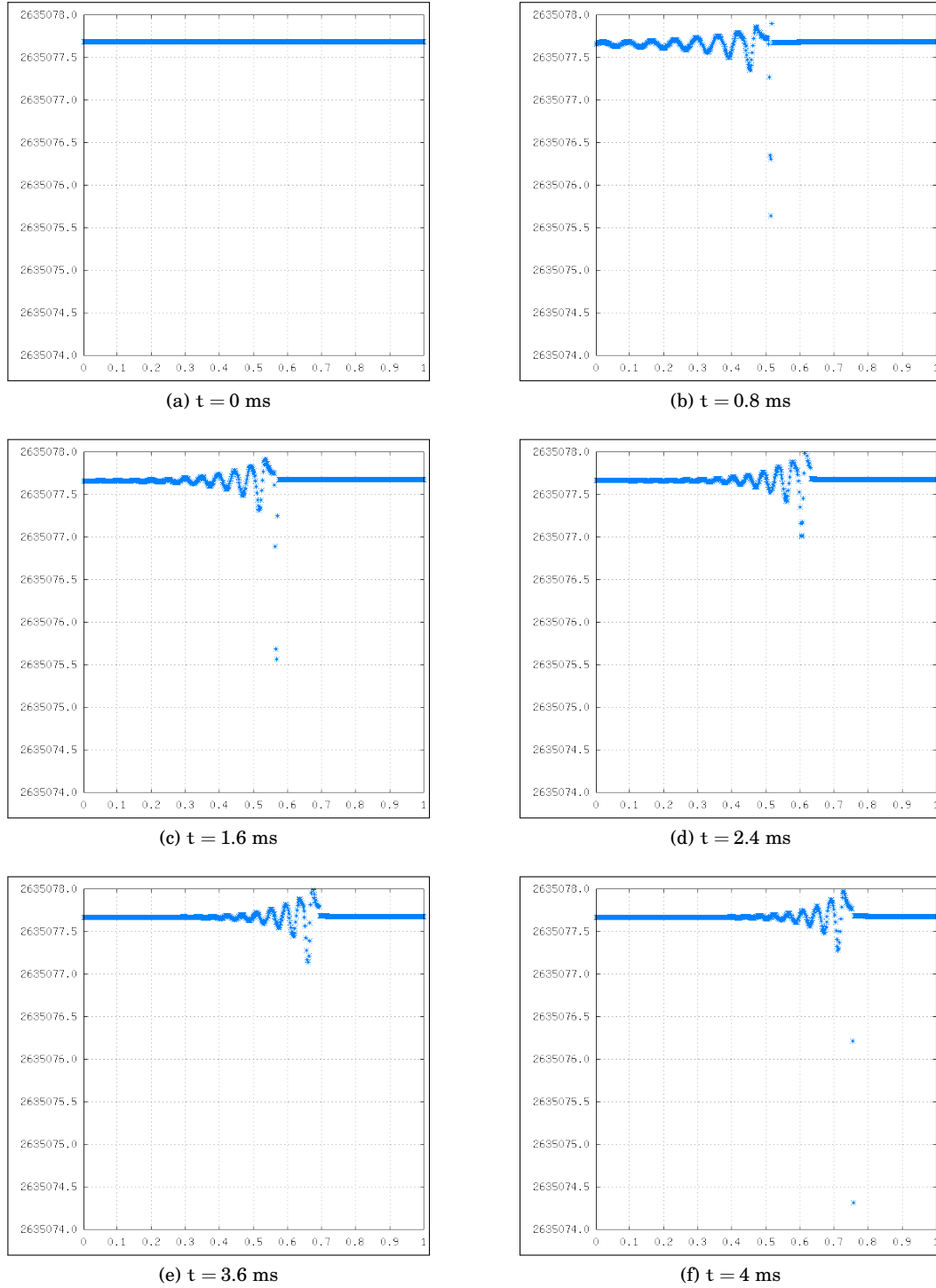


FIG. 10.4.: Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test 10.1.1 avec changement de phase. On remarque que l'ampleur des oscillations est inférieure à 5 Pa. Ce résultat est en accord avec les majorations qu'on avait données à la remarque 6.3 à la page 180

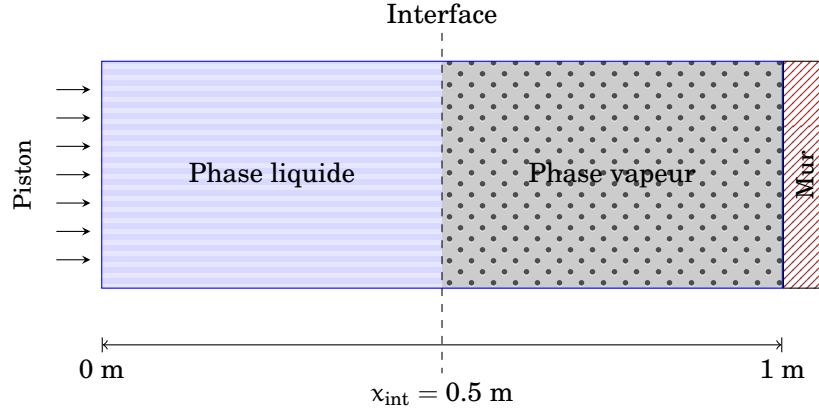


FIG. 10.5.: Géométrie du cas test 10.1.2

10.1.2. Changement de phase par compression

Comme précédemment, on considère un domaine de 1 m de long contenant du liquide ($0 \text{ m} \leq x \leq 0.5 \text{ m}$) et de la vapeur ($0.5 \text{ m} \leq x \leq 1 \text{ m}$) initialement séparés par une interface localisée en $x_{\text{int}} = 0.5 \text{ m}$. La géométrie du cas test est présentée à la figure 10.5. On suppose que les deux phases suivent des lois d'état de type *stiffened gas* et que les caractéristiques des deux phases sont ceux données dans le tableau 6.3 pour l'eau.

On suppose que les deux phases sont initialement au repos à la température uniforme $T_{t=0} = 500 \text{ K}$. Les densités et la pression sont choisies de telle sorte que les deux phases sont à saturation, ainsi $\rho = \rho_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_{t=0}) \approx 817.8534 \text{ kg/m}^3$ à gauche de l'interface, $\rho = \rho_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_{t=0}) \approx 11.7832 \text{ kg/m}^3$ à droite de l'interface et $P = P^{\text{sat}}(T_{t=0}) \approx 2.6351 \times 10^6 \text{ Pa}$ partout.





Les deux parois en $x = 0$ et $x = 1$ sont adiabatiques et à l'extrémité gauche du domaine se trouve un piston se déplaçant de la gauche vers la droite à une vitesse constante tandis que l'extrémité droite est un mur. L'effet du piston est réalisé en imposant une vitesse constante $u_p = 10 \text{ m/s}$ dans les mailles fictives à gauche du domaine avec un flux de masse nul.

Le domaine est discrétisé avec 500 mailles. Le temps varie de $t = 0 \text{ ms}$ à $t = 4 \text{ ms}$ et on néglige tout effet dissipatif.

Résultats et discussion

Ce test consiste à simuler le comportement d'un fluide lors d'une compression. Le mouvement du piston va générer une onde acoustique (dans ce cas il s'agit d'un choc) se déplaçant de la gauche vers la droite dont le front se propage à la vitesse c^{eq} à travers le fluide (vitesse du son d'abord dans le liquide, puis dans le mélange à l'équilibre, enfin dans la vapeur). En touchant l'interface, cette onde va modifier l'équilibre thermodynamique et active les termes sources. Ceux-ci vont alors forcer le système à retourner à l'équilibre et des échanges apparaissent entre les deux phases.

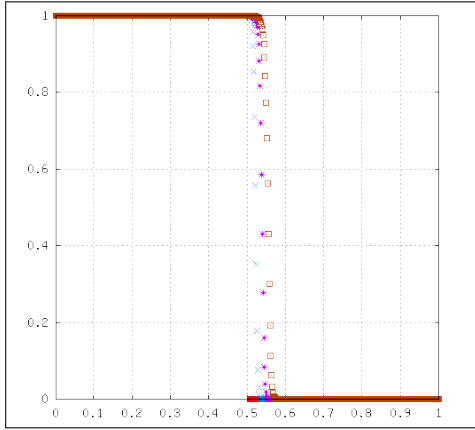
Les figures 10.6-10.7 représentent l'évolution temporelle des profils de la fraction de masse y , de la fraction de volume z , de la densité ρ , de la pression P , de la vitesse u et de la température T sans et avec changement de phase. On a adopté la notation suivante :

	$t = 0.0$ ms
	$t = 1.3$ ms
	$t = 2.6$ ms
	$t = 4.0$ ms

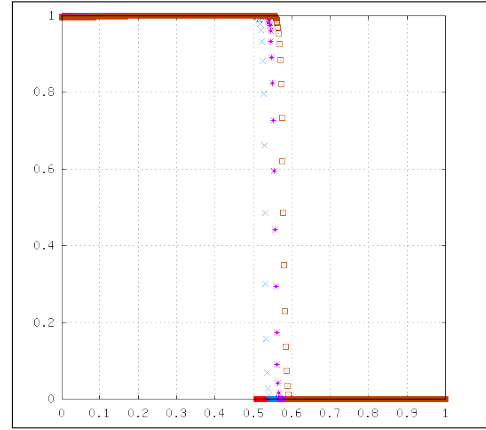
La figure 10.6 à la page suivante montre que l'interface s'épaissit (que se soit sans ou avec changement de phase) et qu'elle se déplace de la gauche vers la droite, ce déplacement étant plus grand lorsqu'on prend en compte le changement de phase, ce qui signifie qu'il y a effectivement liquéfaction de la vapeur (ceci est bien évident sur les figures représentant la fraction de volume z et la densité ρ).

On remarque que la vitesse du liquide dans la maille en contact du piston est bien celle du piston, validant ainsi la condition limite à la paroi mobile. De plus, on observe un début de vaporisation du liquide à proximité du piston à cause de l'onde de détente précédant l'onde de choc (on a remarqué ce phénomène dans le même cas test réalisé avec des lois de type gaz parfait).

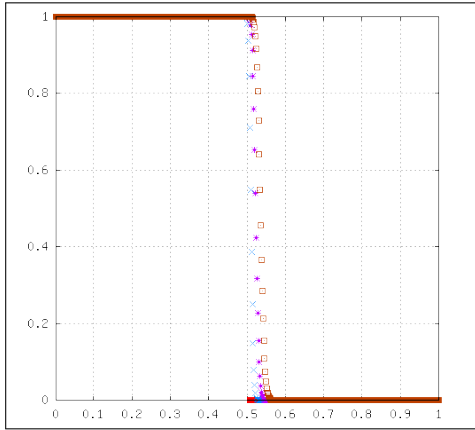
Ces premiers résultats numériques permettent d'affirmer que, malgré le caractère presque incompressible du liquide, le grand écart des densités et le calcul approché du changement de phase, on peut effectuer des résolutions numériques stables. Ils montrent que le modèle physique retenu permet de simuler numériquement le comportement d'une interface liquide-vapeur vue comme une zone volumique de transition. De plus, aucun problème de diffusion ou de redressement numérique de l'interface ne semble survenir : l'épaisseur de l'interface reste faible quelles que soient les perturbations qu'elle subit.



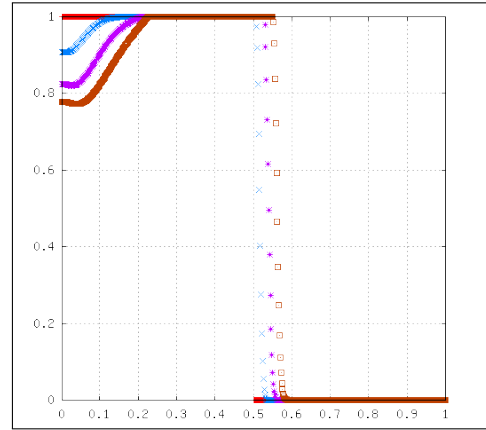
(a) Évolution en temps de la fraction de masse y sans changement de phase



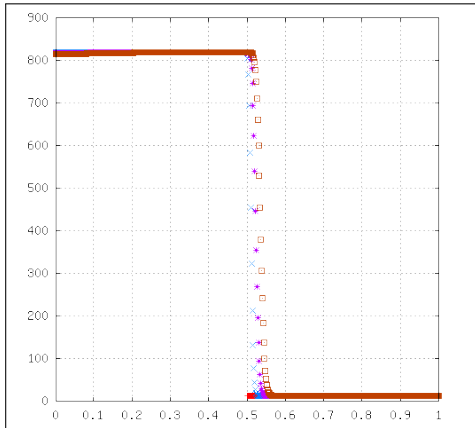
(b) Évolution en temps de la fraction de masse y avec changement de phase



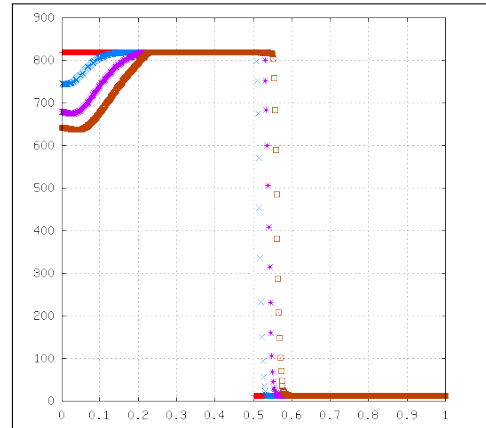
(c) Évolution en temps de la fraction de volume z sans changement de phase



(d) Évolution en temps de la fraction de volume z avec changement de phase



(e) Évolution en temps de la densité ρ sans changement de phase



(f) Évolution en temps de la densité ρ avec changement de phase

FIG. 10.6.: Évolution en temps de la solution du cas test 10.1.2 sans et avec changement de phase.

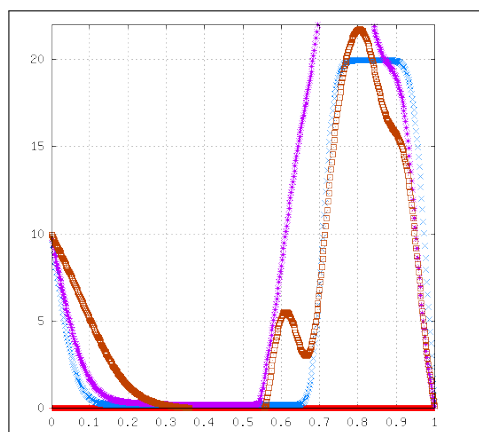
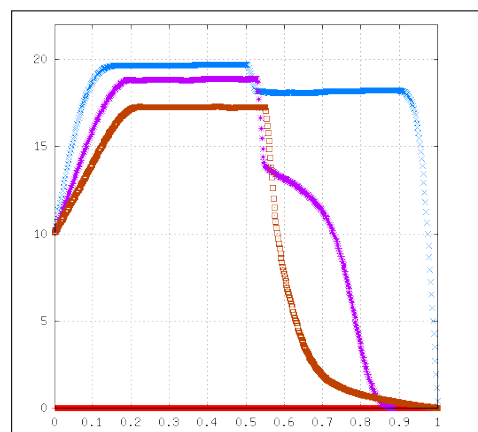
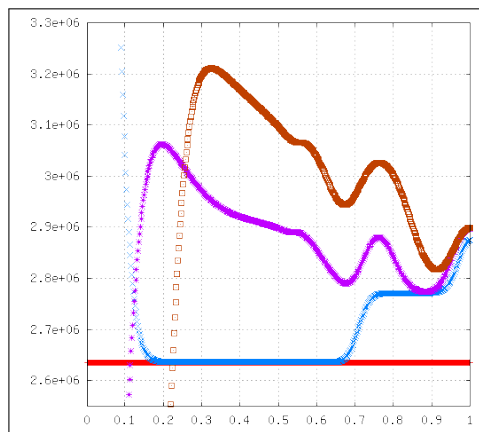
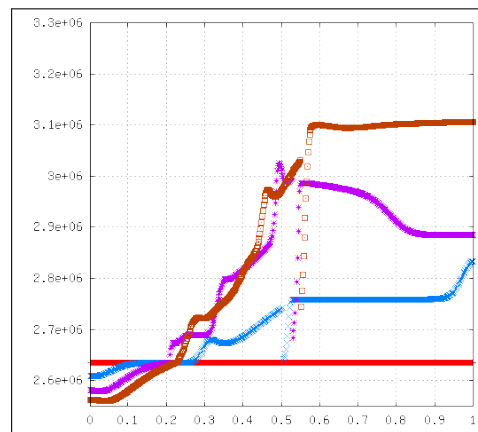
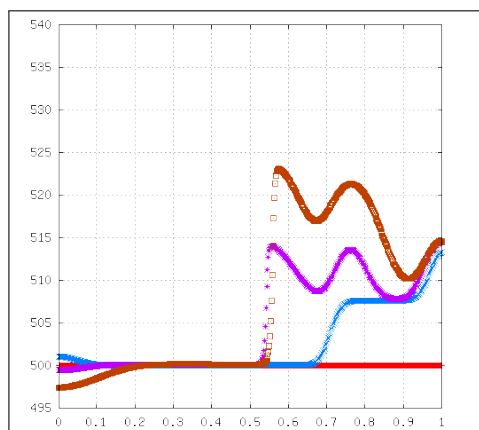
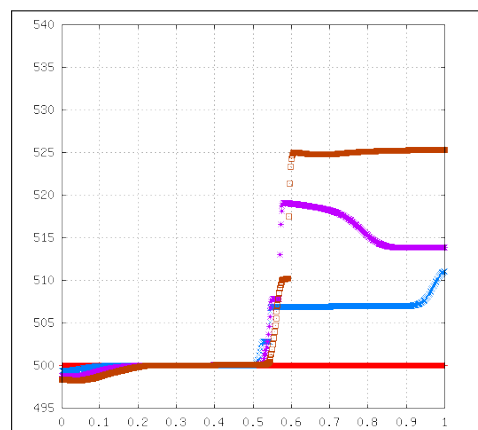

 (a) Évolution en temps de la vitesse u sans changement de phase

 (b) Évolution en temps de la vitesse u avec changement de phase

 (c) Évolution en temps de la pression P sans changement de phase

 (d) Évolution en temps de la pression P avec changement de phase

 (e) Évolution en temps de la température T sans changement de phase

 (f) Évolution en temps de la température T avec changement de phase

FIG. 10.7.: Évolution en temps de la solution du cas test 10.1.2 sans et avec changement de phase

Convergence en maillage On étudie le comportement du schéma lorsque le nombre de mailles tend vers l'infinie, autrement dit lorsque le pas d'espace Δx tend vers zéro. La solution est approchée avec 250 mailles, puis 500 et 1000 mailles sur les figures 10.8 et 10.9.

On remarque tout d'abord sur la première colonne des figures (c'est-à-dire la simulation obtenue avec 250 mailles) que, malgré le faible nombre de mailles, la zone interfaciale garde une grande cohérence et elle se déplace régulièrement. On remarque également qu'en augmentant le nombre de mailles aucune instabilité ne se développe malgré quelques légères oscillations en pression qui se forment à l'interface et qui se propagent dans le liquide (dues à son caractère presque incompressible). Ceci montre que la solution approchée converge lorsque le pas du maillage tend vers zéro.

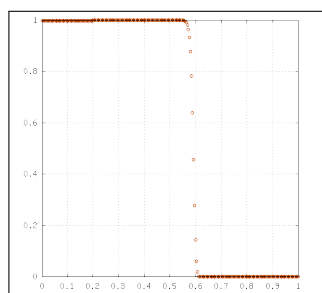
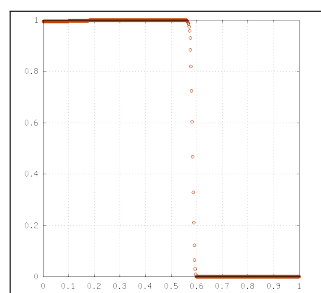
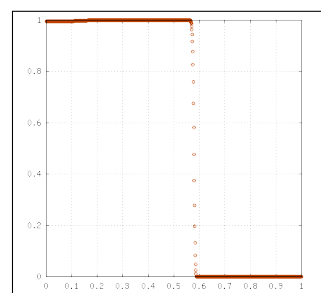
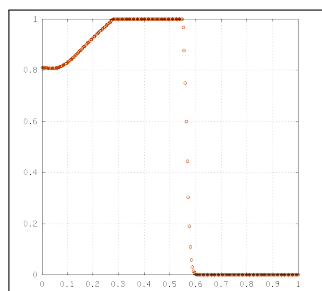
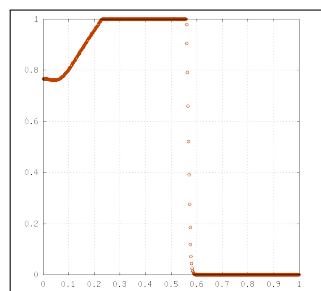
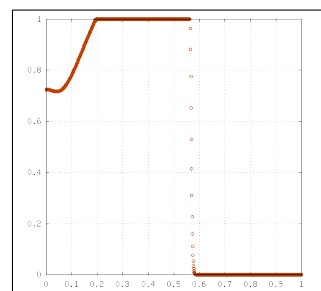
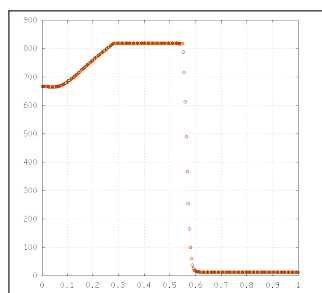
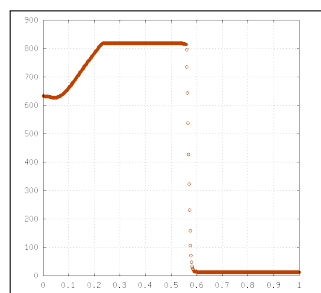
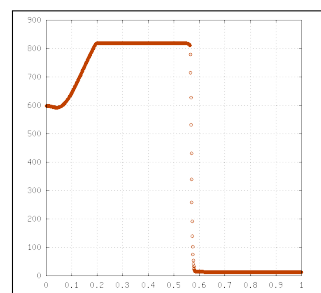
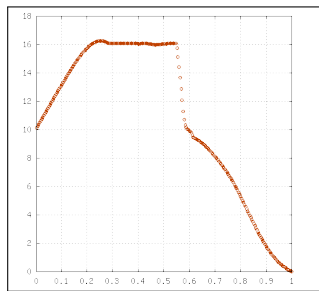
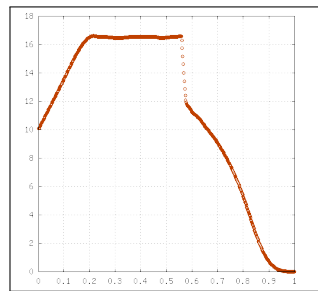

 (a) Fraction massique y avec 250 mailles

 (b) Fraction massique y avec 500 mailles

 (c) Fraction massique y avec 1000 mailles

 (d) Fraction volumique z avec 250 mailles

 (e) Fraction volumique z avec 500 mailles

 (f) Fraction volumique z avec 1000 mailles

 (g) Densité ρ avec 250 mailles

 (h) Densité ρ avec 500 mailles

 (i) Densité ρ avec 1000 mailles

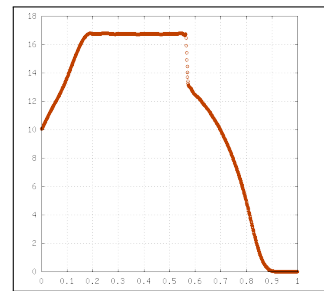
 FIG. 10.8.: Comparaison des solutions du cas test 10.1.2 avec changement de phase à $t = 4$ ms pour 250, 500 et 1000 mailles



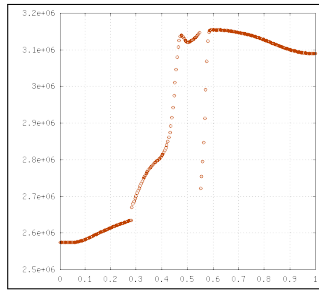
(a) Vitesse u avec 250 mailles



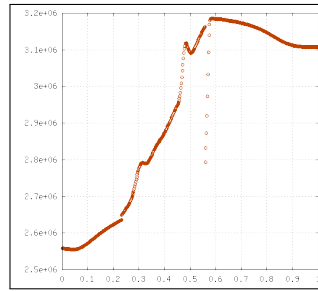
(b) Vitesse u avec 500 mailles



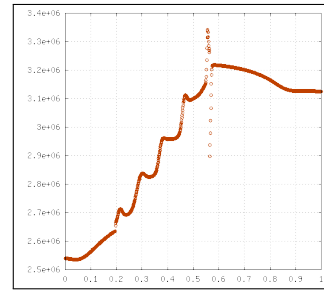
(c) Vitesse u avec 1000 mailles



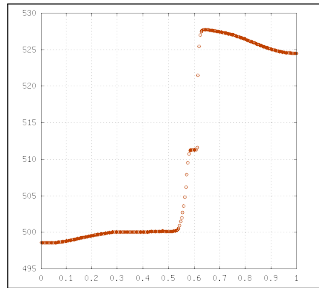
(d) Pression P avec 250 mailles



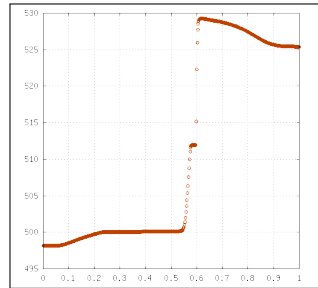
(e) Pression P avec 500 mailles



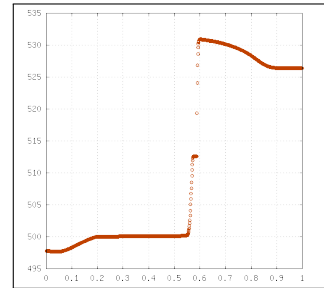
(f) Pression P avec 1000 mailles



(g) Temperature T avec 250 mailles



(h) Temperature T avec 500 mailles



(i) Temperature T avec 1000 mailles

FIG. 10.9.: Comparaison des solutions du cas test 10.1.2 avec changement de phase à $t = 4$ ms pour 250, 500 et 1000 mailles.

Convergence en temps On étudie maintenant le comportement du schéma lorsque le pas de temps Δt tend vers zéro. Il est connu que la méthode de splitting peut donner des vitesses de propagation fausses (voir LeVeque et Yee [72] par exemple). En effet, dans certains cas, ce front avance à chaque pas de temps d'un certain nombre de mailles fixe. Ainsi, le front de changement de phase avancera d'autant plus vite que le pas de temps sera petit. Cet artefact numérique peut se rencontrer lorsque la dernière étape de la méthode de splitting est résolue en intégrant les ODE au lieu de projeter la solution sur la variété d'équilibre (mise à jour des fractions phasiques y et z). Dans notre cas, en projetant sur cette variété d'équilibre, ce problème n'apparaît pas.

Dans la figure 10.10 à la page suivante nous avons représenté la solution obtenue avec la condition CFL

$$\Delta t = \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\max_{k=1,\dots,5} |\lambda_k|} \quad (10.1)$$

et la condition CFL

$$\Delta t = \frac{1}{20} \frac{\Delta x}{\max_{k=1,\dots,5} |\lambda_k|} \quad (10.2)$$

toujours à l'instant $t = 4$ ms. Le domaine est discrétisé avec 500 mailles en espace. On constate donc que la vitesse du front de changement de phase est bien indépendante du pas de temps.

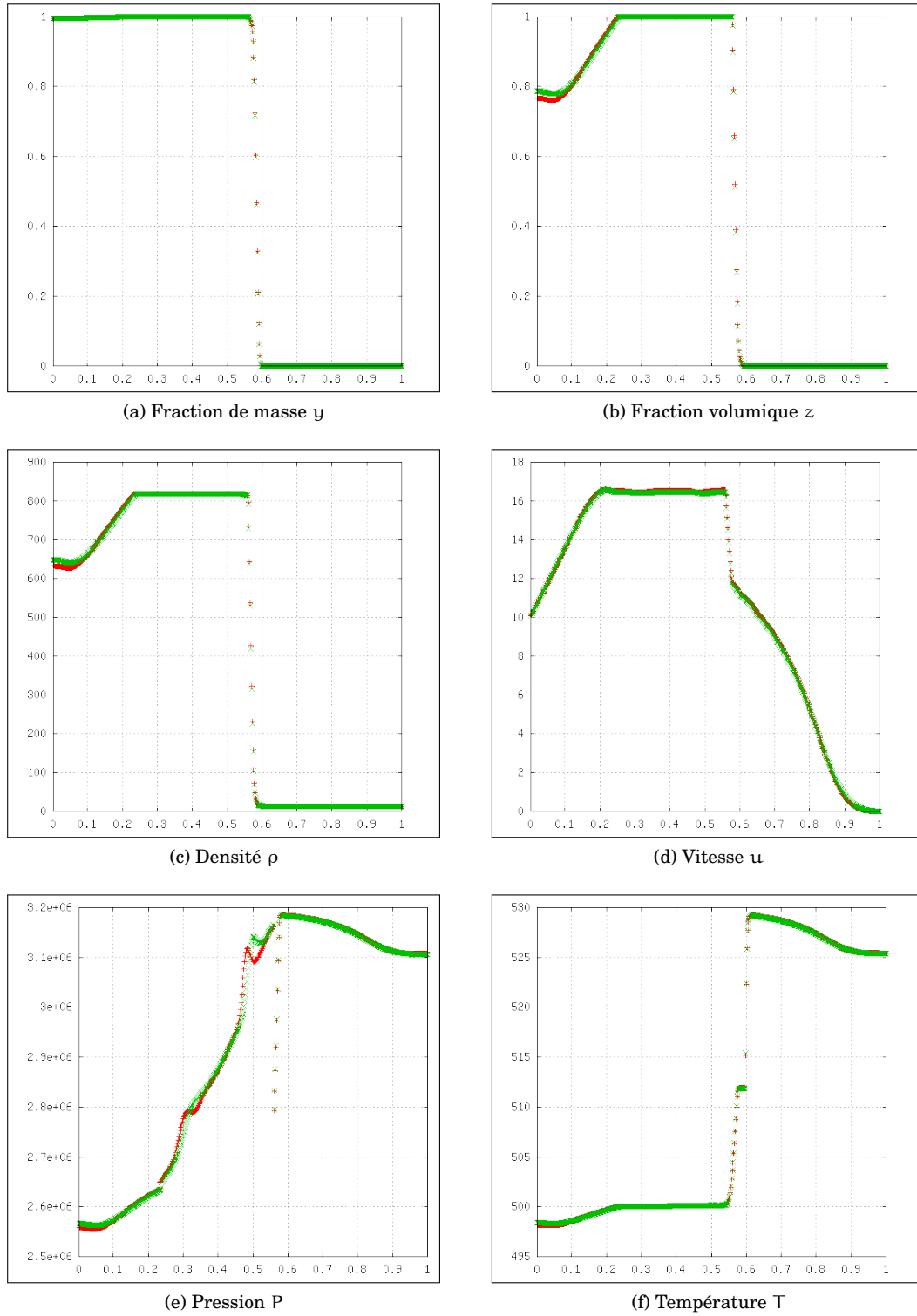


FIG. 10.10.: Comparaison des solutions du cas test 10.1.2 avec changement de phase à $t = 4$ ms pour Δt donné par la condition CFL (10.1) (signe $+$) et pour Δt donné par la condition CFL (10.2) (signe \times)

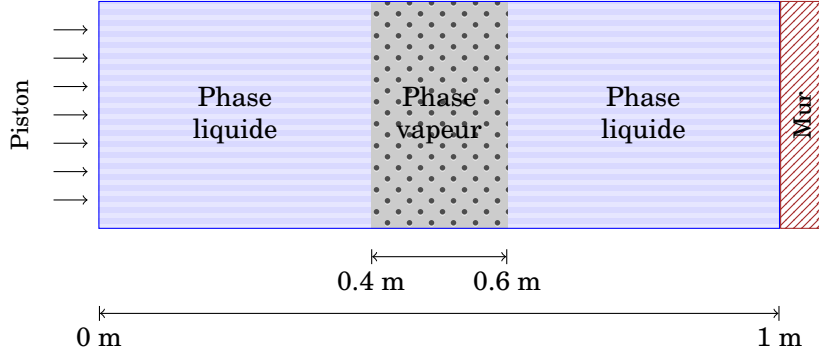


FIG. 10.11.: Géométrie du cas test 10.1.3

10.1.3. Compression d'une bulle unidimensionnelle de vapeur

Le but de cette simulation est de montrer la disparition d'une phase. Le problème que l'on souhaite traiter peut se schématiser comme représenté sur la figure 10.11. On considère un réservoir fermé contenant initialement un corps pur à saturation. Ce réservoir est fermé par la gauche par un piston susceptible de se déplacer horizontalement sans frottement. Lorsque le piston est mis en mouvement, un changement de phase se produit : il y a évaporation si le piston se déplace vers la gauche et condensation s'il se déplace vers la droite.

On considère un domaine de 1 m de long discrétisé par 200 mailles. Une «bulle» de vapeur d'eau est positionnée au centre du domaine et elle est entourée par de l'eau liquide comme en figure 10.11. Le «rayon» initial de la bulle est $r = 0.1$ m.

Les deux phases sont décrites par deux lois d'état de type *stiffened gas* dont les coefficients ont été donnés au tableau 6.3 et la loi de changement de phase est celle établie au chapitre 6.

La température initiale est fixée à $T_0 = 439$ K et le fluide est initialement au repos ($u_0 = 0$) dans tout le domaine. À l'instant $t = 0$ les deux phases sont à saturation donc les densités du liquide ρ_{liq} et de la vapeur ρ_{vap} valent $\rho_{\text{liq}} = \rho_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_0) \approx 929.7941874$ kg/m³, $\rho_{\text{vap}} = \rho_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_0) \approx 4.091902657$ kg/m³ et la pression est égale à $P = P^{\text{sat}}(T_0) = 8.034337432 \times 10^5$ Pa pour les deux phases. On suppose que sur le coté gauche du domaine il y a un piston qui se déplace de la gauche vers la droite. Cette compression est simulée en imposant une vitesse constante $u_p = 30$ m/s sur les mailles fictives. Sur le coté droit du domaine il y a un mur.

Résultats et discussion

Les figures 10.12, 10.13, 10.14, 10.15, 10.16 et 10.17 représentent respectivement l'évolution temporelle de la fraction massique y , de la fraction volumique z , de la densité ρ , de la vitesse u , de la pression P et de la température T .

Le piston fait augmenter la pression dans le fluide et donc, à fortiori, à l'intérieur de la «bulle» qui liquéfie. Au temps final on constate la transformation de toute la vapeur en liquide.

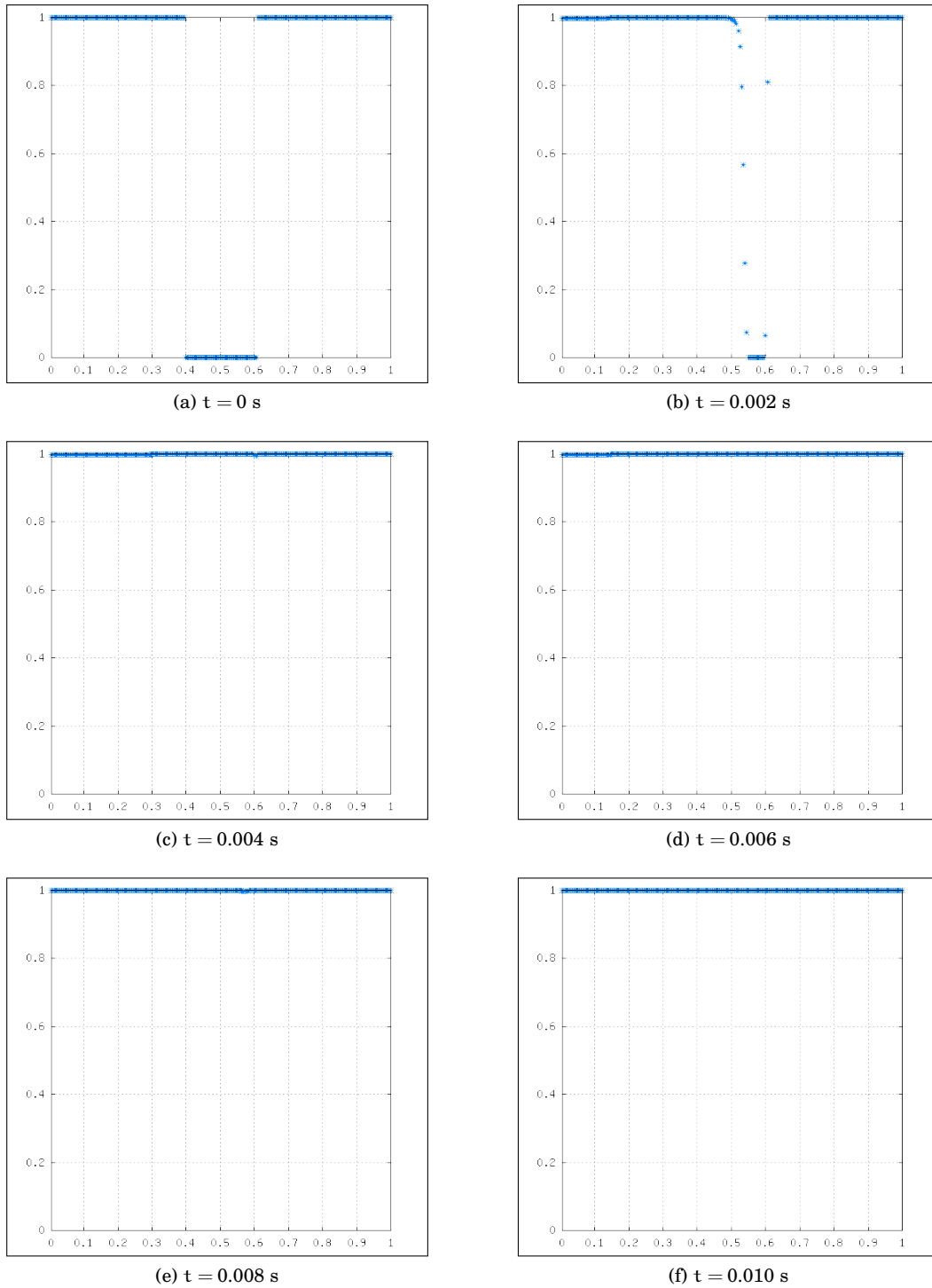


FIG. 10.12.: Évolution en temps du profil de la fraction de masse y pour le cas test 10.1.3

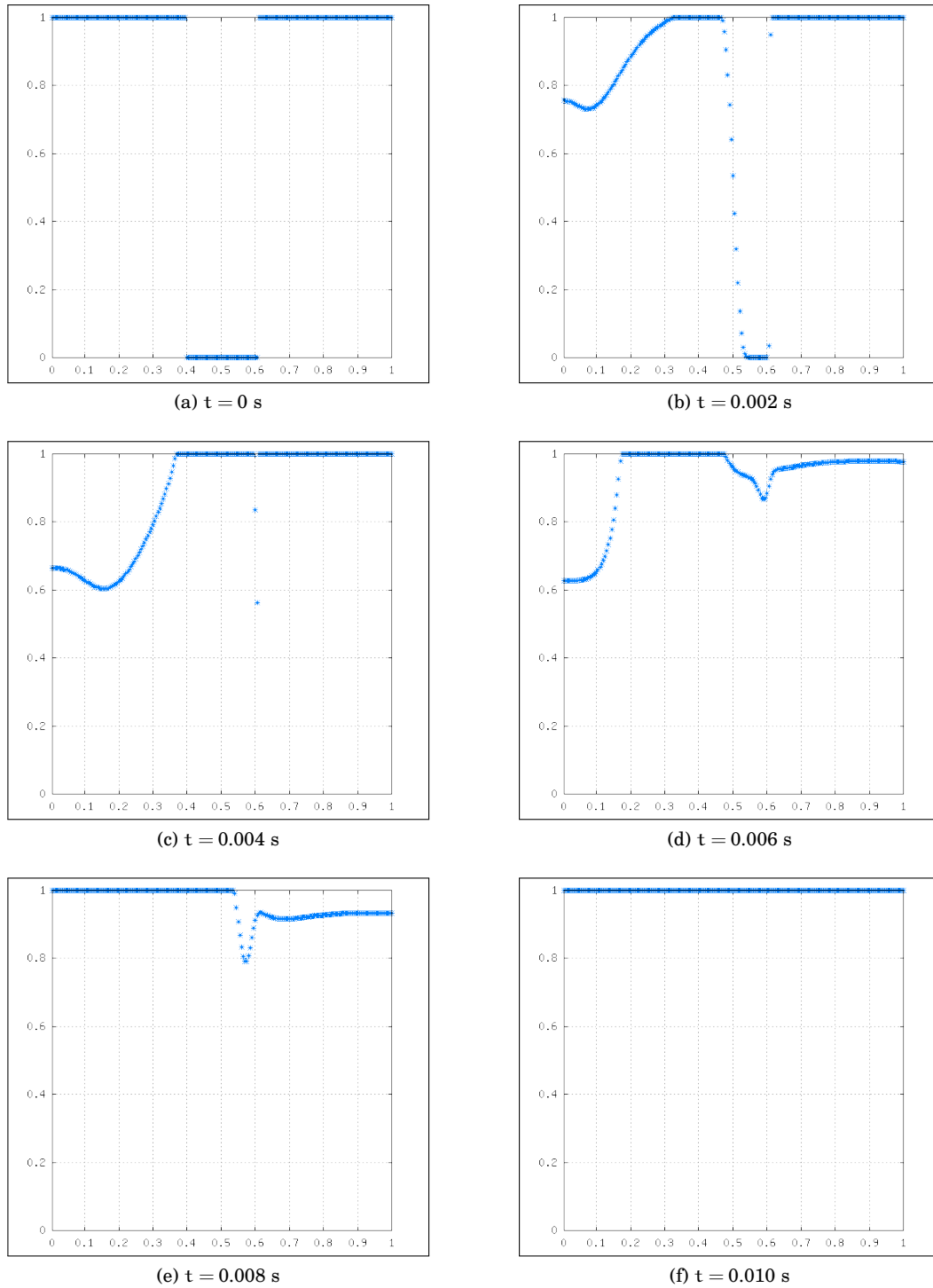


FIG. 10.13.: Évolution en temps du profil de la fraction de volume z pour le cas test 10.1.3

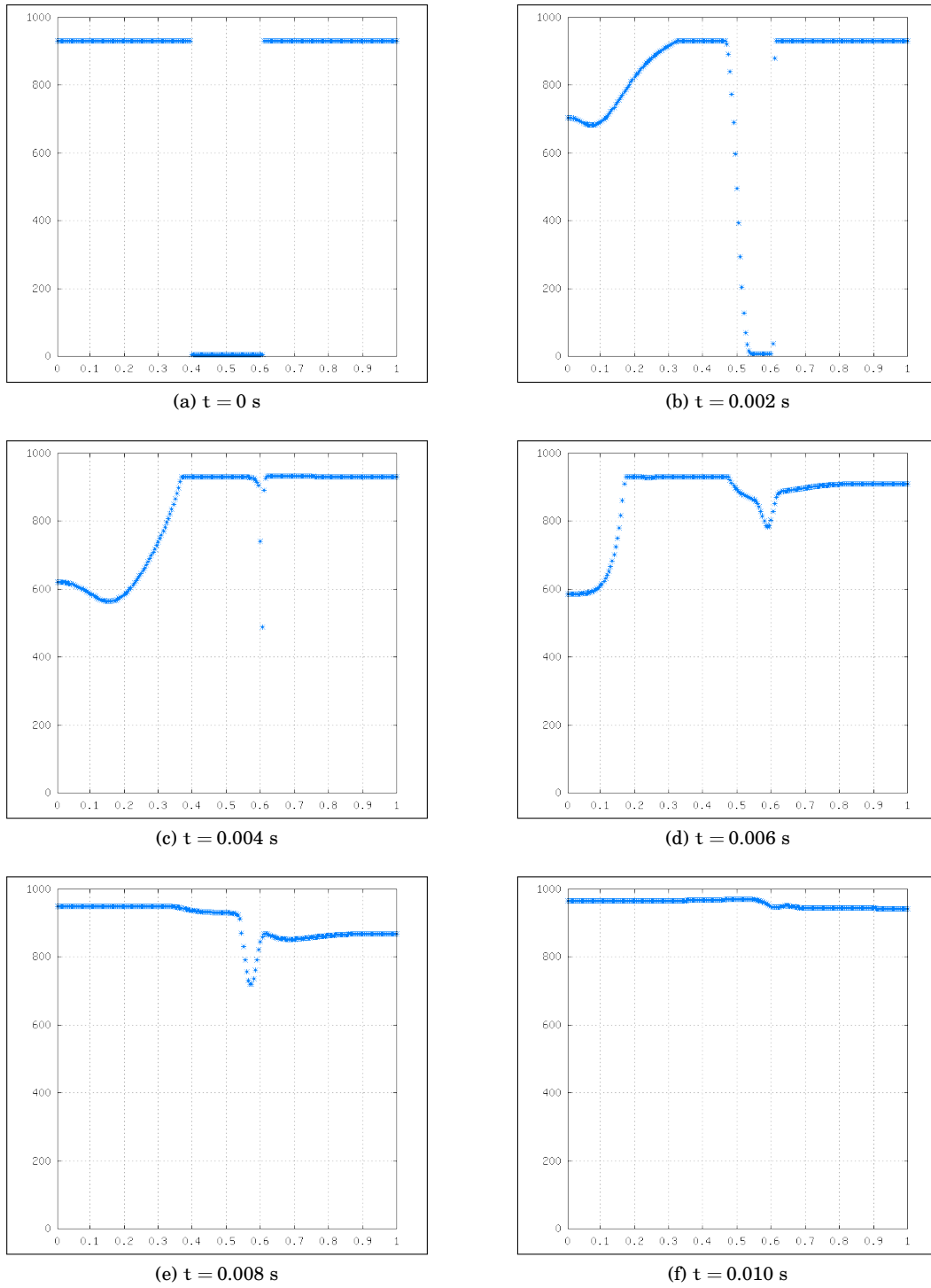


FIG. 10.14.: Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test 10.1.3

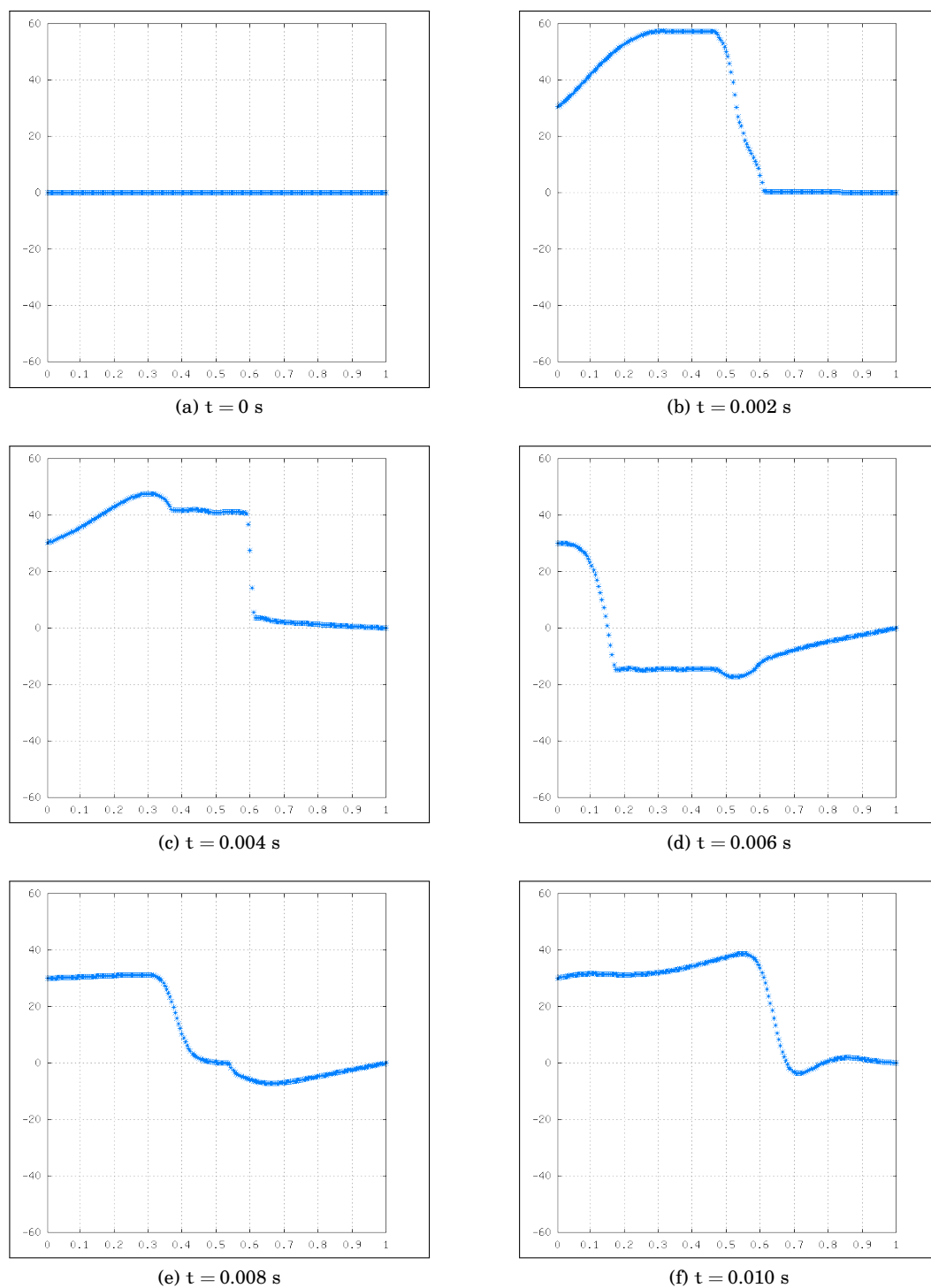


FIG. 10.15.: Évolution en temps du profil de la vitesse u pour le cas test 10.1.3

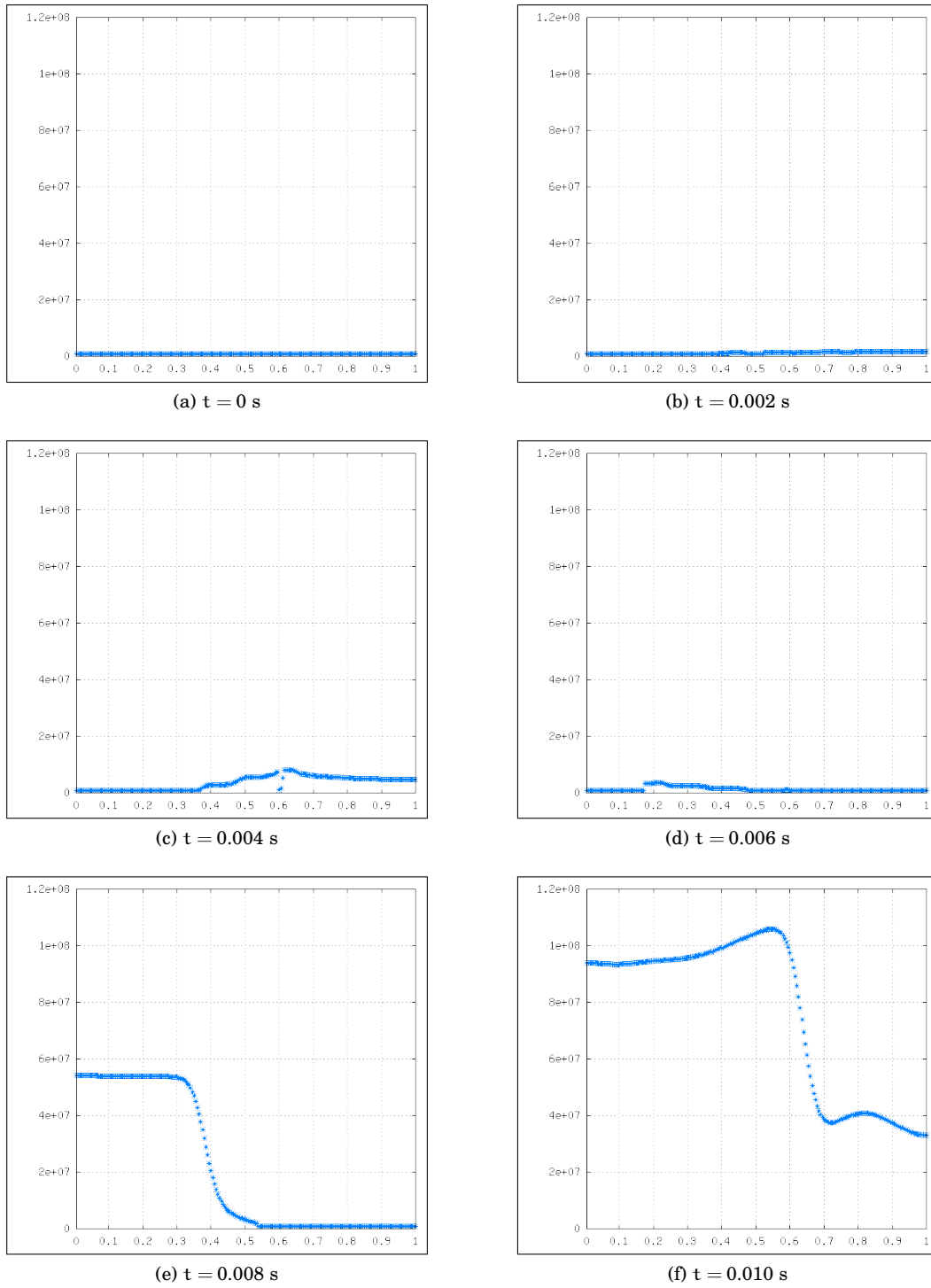


FIG. 10.16.: Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test 10.1.3

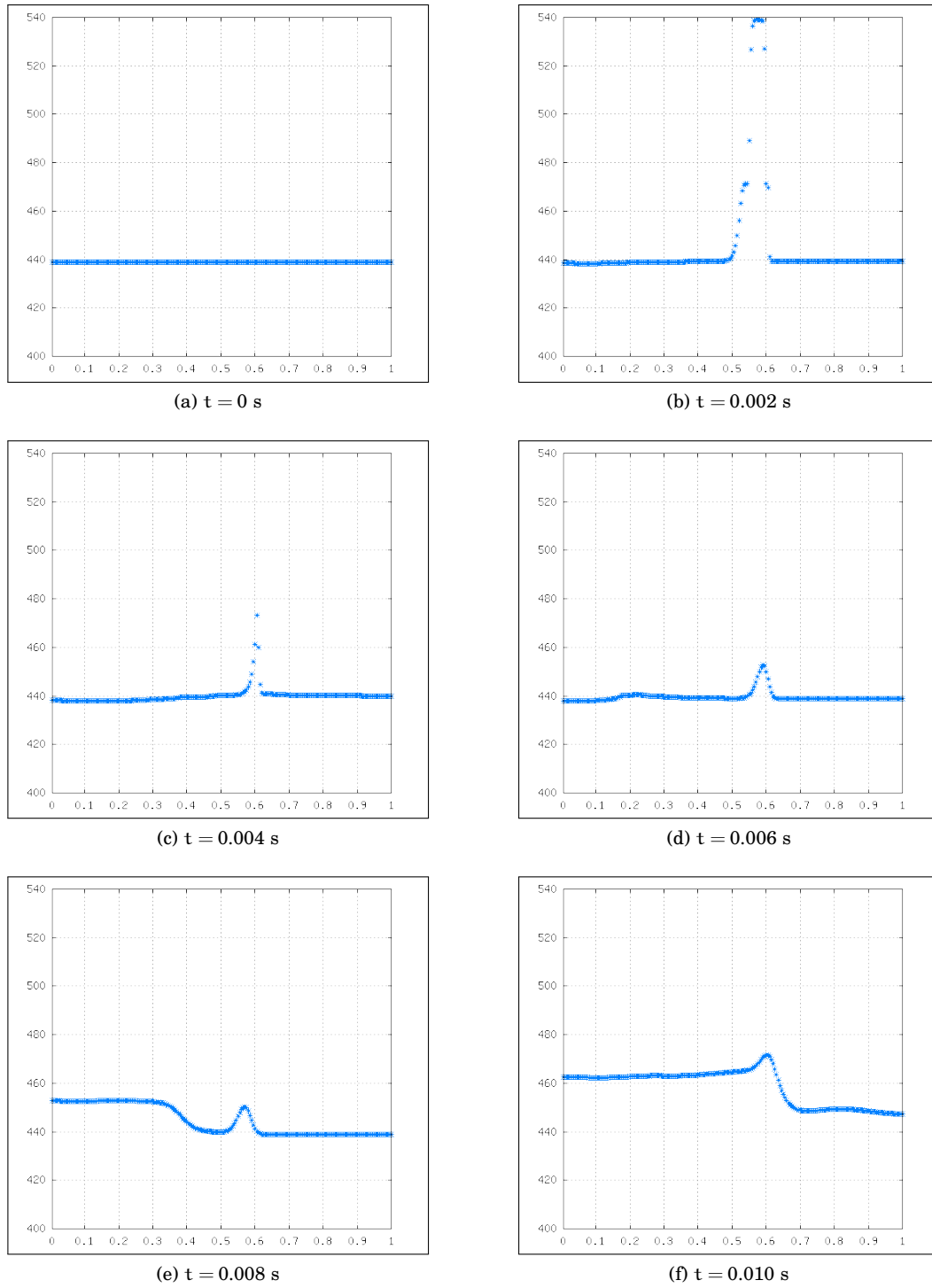


FIG. 10.17.: Évolution en temps du profil de la température T pour le cas test 10.1.3

10.2. Simulations numériques bidimensionnelles

Nous présentons dans ce paragraphe des résultats de simulations numériques bidimensionnelles de phénomènes de changement de phase dans de nombreuses situations : dépressurisation rapide, cavitation, ébullition, etc. Schématiquement, les changements de phase peuvent apparaître de deux manières. La première, qui est gouvernée par la diffusion thermique, est due à un chauffage du liquide. La seconde est due à une baisse/augmentation de pression. Puisque la vitesse de propagation de ces fronts d'évaporation/liquéfaction est beaucoup plus grande que la vitesse de diffusion thermique, dans les simulations de ce dernier type on négligera le terme de diffusion de la chaleur.

10.2.1. Compression d'une bulle de vapeur

On considère un domaine carré de 1 m de côté discrétisé sur une grille de 300×300 mailles. Une bulle de vapeur d'eau est positionnée au centre du domaine entourée par de l'eau liquide comme en figure 10.18 à la page ci-contre. Le rayon initial de la bulle est $r = 0.2$ m.

Les deux phases sont décrites par deux lois d'état de type *stiffened gas* dont les coefficients ont été donnés au tableau 6.3 et la loi de changement de phase est celle établie au chapitre 6.

La température initiale est fixée à $T_0 = 439$ K et le fluide est initialement au repos ($\mathbf{u}_0 = \mathbf{0}$) dans tout le domaine. À l'instant $t = 0$ s les deux phases sont à saturation donc les densités du liquide ρ_{liq} et de la vapeur ρ_{vap} valent respectivement $\rho_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_0) \approx 929.7941874$ kg/m³, $\rho_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_0) \approx 4.091902657$ kg/m³ et la pression est égale à $P = P^{\text{sat}}(T_0) \approx 8.034337432 \times 10^5$ Pa pour les deux phases.

On suppose que sur le côté gauche du domaine il y a un piston qui se déplace de la gauche vers la droite. Cette compression est modélisée en imposant une vitesse constante $u_p = 30$ m/s dans les mailles fictives. Les autres conditions au bord sont des murs. Le flux de masse est donc nul sur tous les bords du domaine.

Résultats et discussion

La figure 10.19 montre l'évolution temporelle de la fraction de masse y dans l'intervalle de temps $t = 0$ ms, $t = 3.60$ ms. Les figures 10.20 et 10.21 montrent l'évolution temporelle de la densité et de la pression respectivement.

Le mouvement du piston génère une onde de pression qui comprime la vapeur. Puisque la pression augmente, la vapeur commence à liquéfier et la bulle de vapeur se rétrécit jusqu'à disparaître.

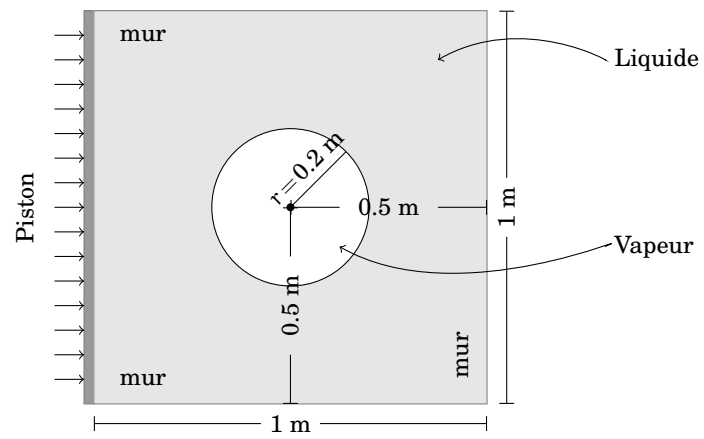


FIG. 10.18.: Géométrie du cas test 10.2.1.

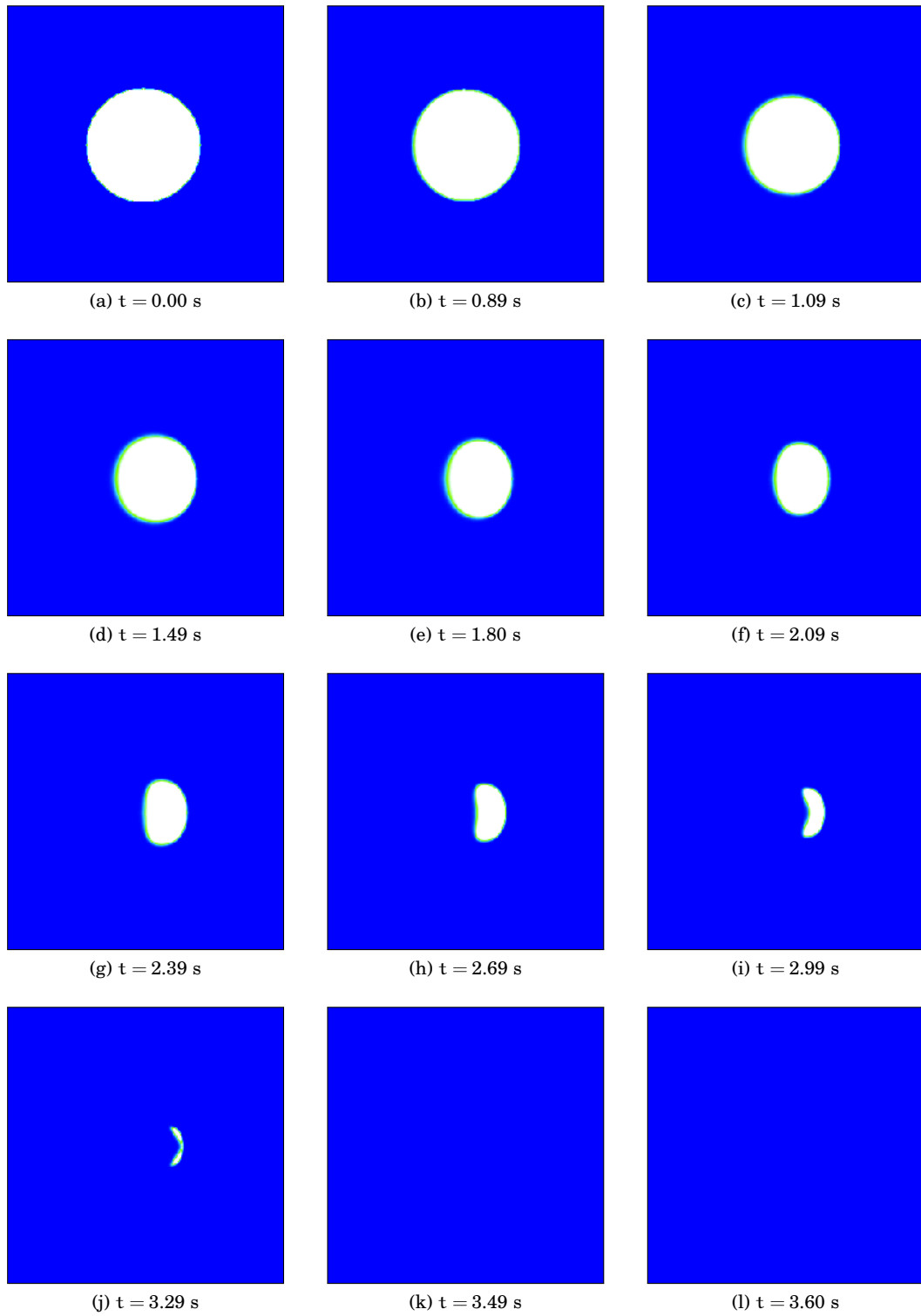


FIG. 10.19.: Évolution en temps du profil de la fraction de masse y du cas test 10.2.1.

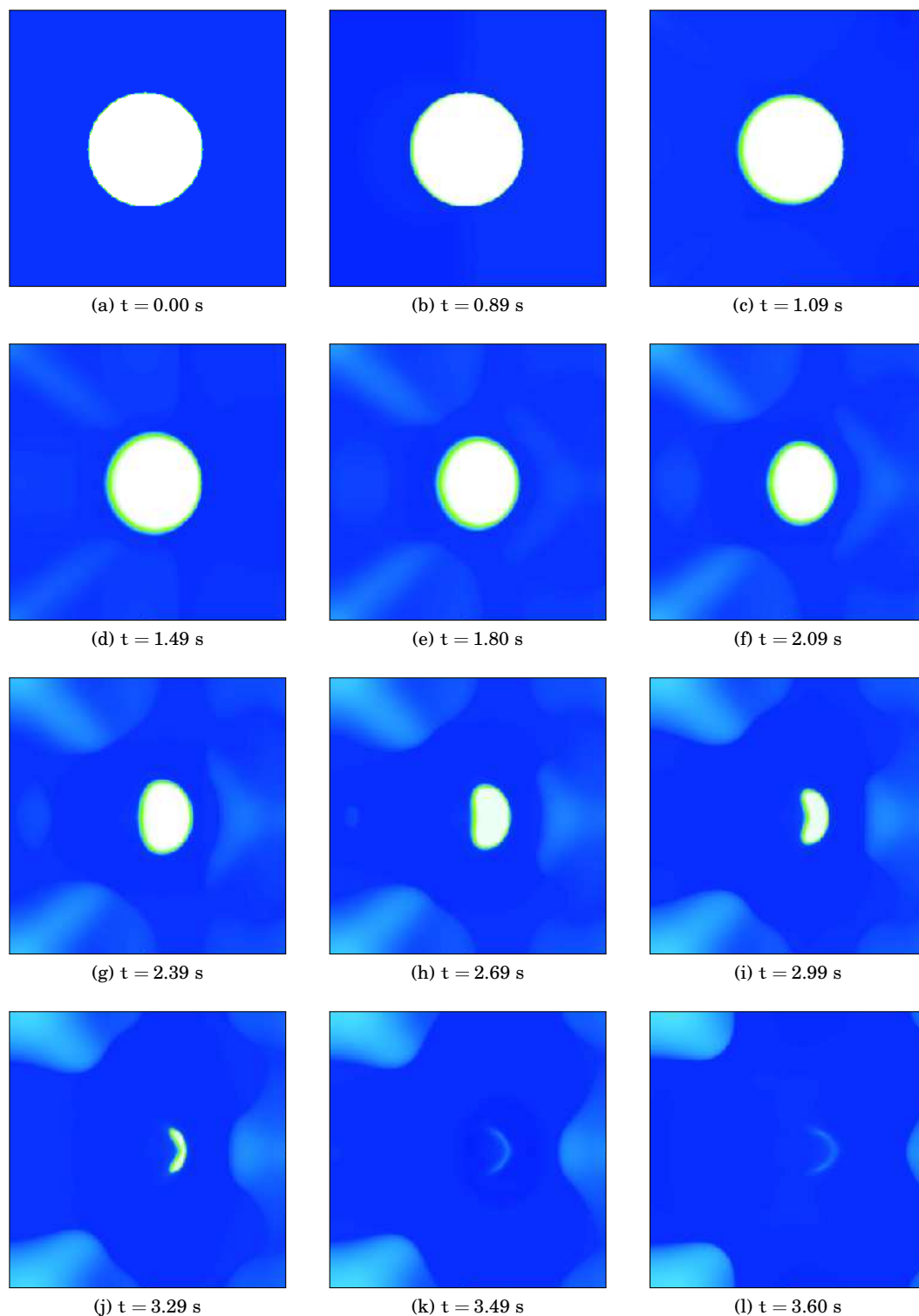


FIG. 10.20.: Évolution en temps du profil de la densité ρ du cas test 10.2.1

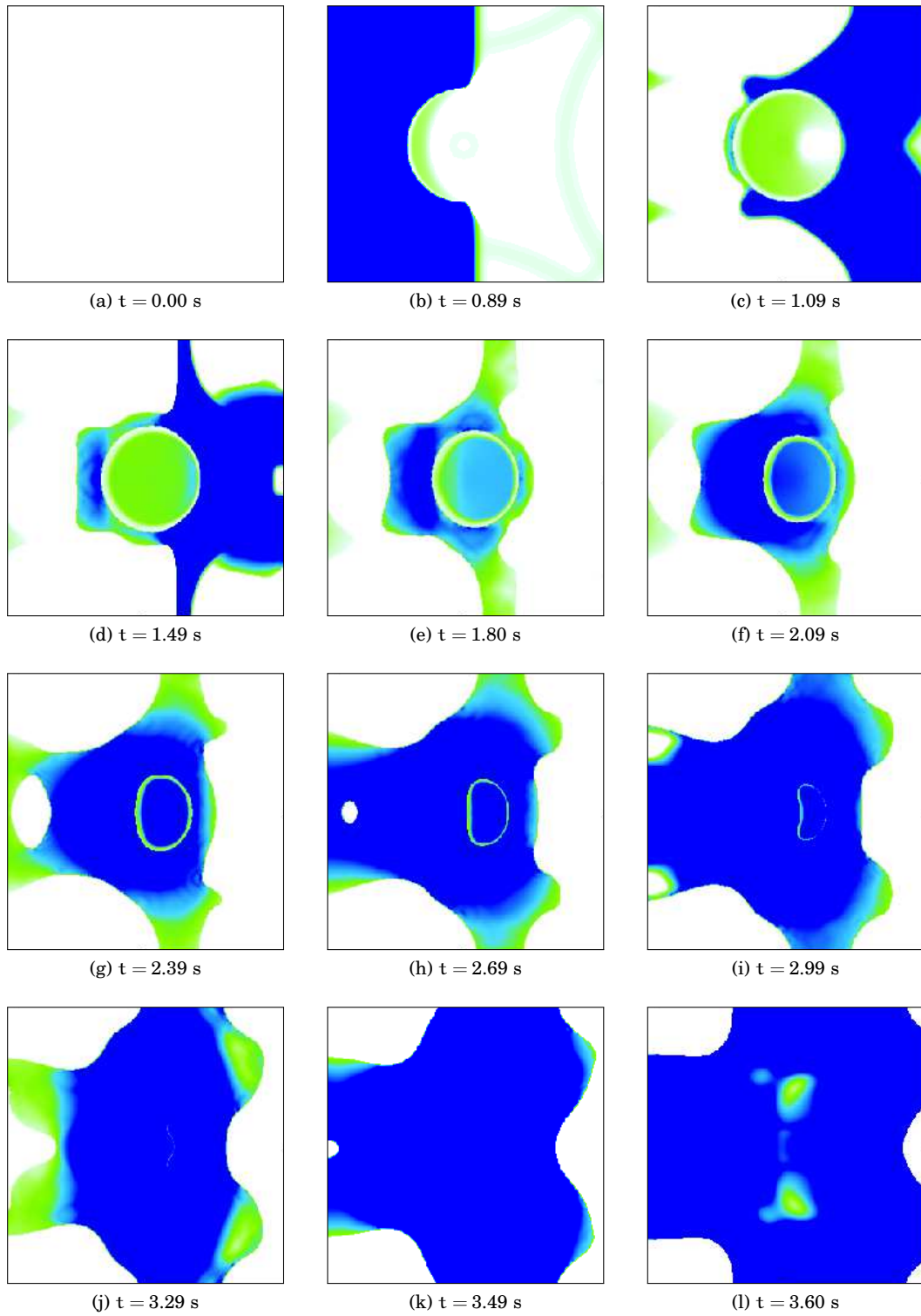


FIG. 10.21.: Évolution en temps du profil de la pression P du cas test 10.2.1.

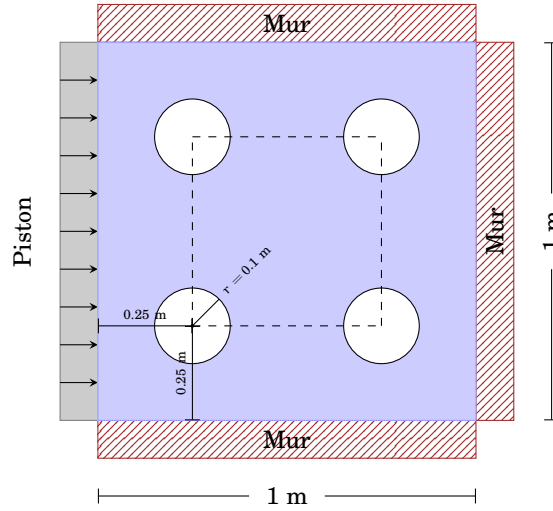


FIG. 10.22.: Géométrie du cas test 10.2.2

10.2.2. Compression de quatre bulles de vapeur

On considère un domaine carré de 1 m de coté discrétisé sur une grille de 300×300 mailles. Quatre bulles de vapeur d'eau sont positionnées comme en figure 10.22 et entourées par de l'eau liquide. Le rayon initial de chaque bulle est $r = 0.1$ m.

Les deux phases sont décrites par deux lois d'état de type *stiffened gas* dont les coefficients ont été donnés au tableau 6.3 et la loi de changement de phase est celle établie au chapitre 6.

La température initiale est fixée à $T_0 = 439$ K et le fluide est initialement au repos ($\mathbf{u}_0 = \mathbf{0}$) dans tout le domaine. À l'instant $t = 0$ s les deux phases sont à saturation donc les densités du liquide ρ_{liq} et de la vapeur ρ_{vap} valent respectivement $\rho_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_0) \approx 929.7941874$ kg/m³, $\rho_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_0) \approx 4.091902657$ kg/m³ et la pression est égale à $P = p^{\text{sat}}(T_0) \approx 8.034337432 \times 10^5$ Pa pour les deux phases.

On suppose que sur le coté gauche du domaine il y a un piston qui se déplace de la gauche vers la droite. Cette compression est modélisée en imposant une vitesse constante $u_p = 30$ m/s dans les mailles fictives. Les autres conditions au bord sont des murs réfléchissants. Le flux de masse est donc nul sur tous les bords du domaine.

Résultats et discussion

Les figures 10.23-10.24-10.25-10.26-10.27 montrent respectivement l'évolution temporelle de la fraction de masse y , de la fraction volumique z , de la densité ρ , de la pression P et de la température T dans l'intervalle de temps $t = 0$ ms, $t = 2.1$ ms.

Comme dans le cas précédent avec une seule bulle de vapeur, le mouvement du piston génère une onde de pression qui comprime la vapeur à partir des bulles les plus proches au piston. Puisque la pression augmente, la vapeur liquéfie : les bulles de vapeur se rétrécissent et disparaissent.

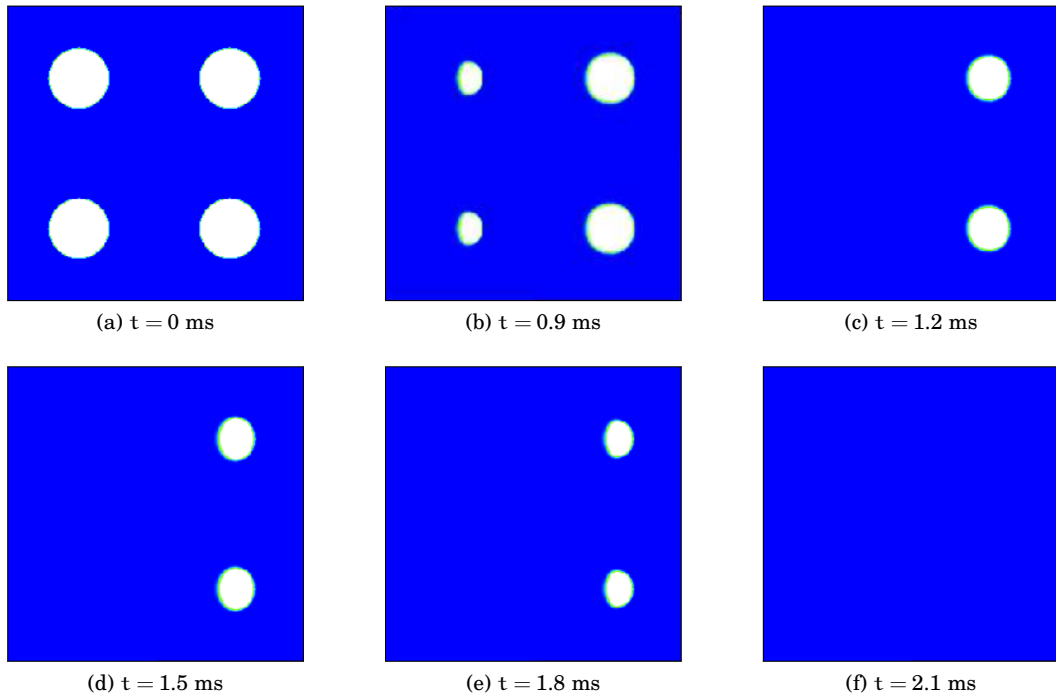


FIG. 10.23.: Évolution en temps du profil de la fraction de masse y pour le cas test 10.2.2.

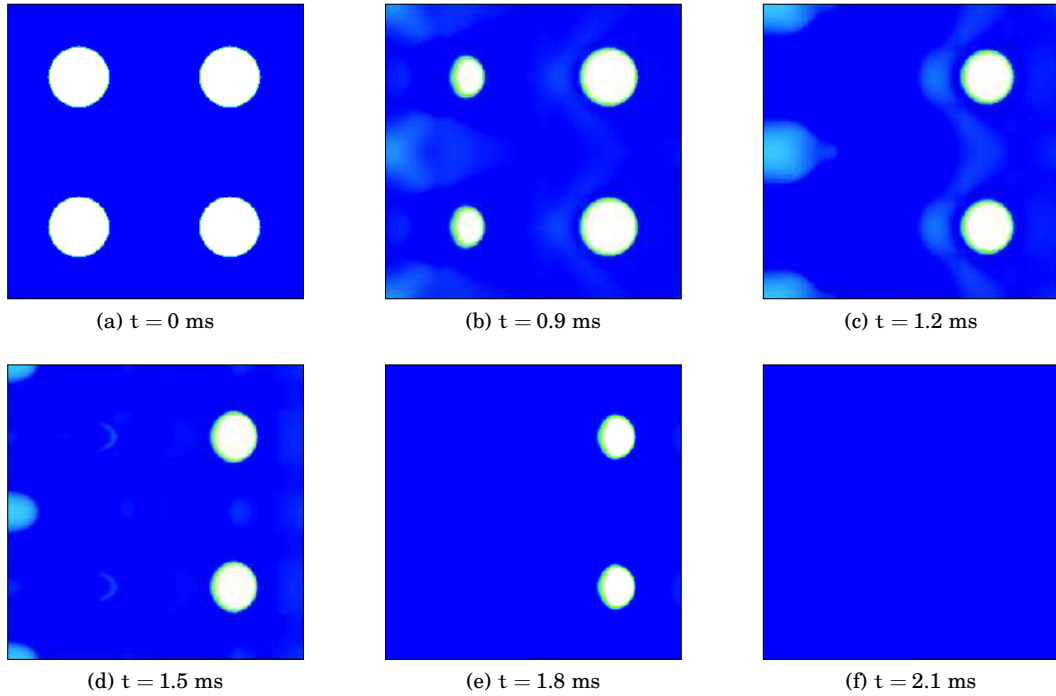


FIG. 10.24.: Évolution en temps du profil de la fraction volumique z pour le cas test 10.2.2.

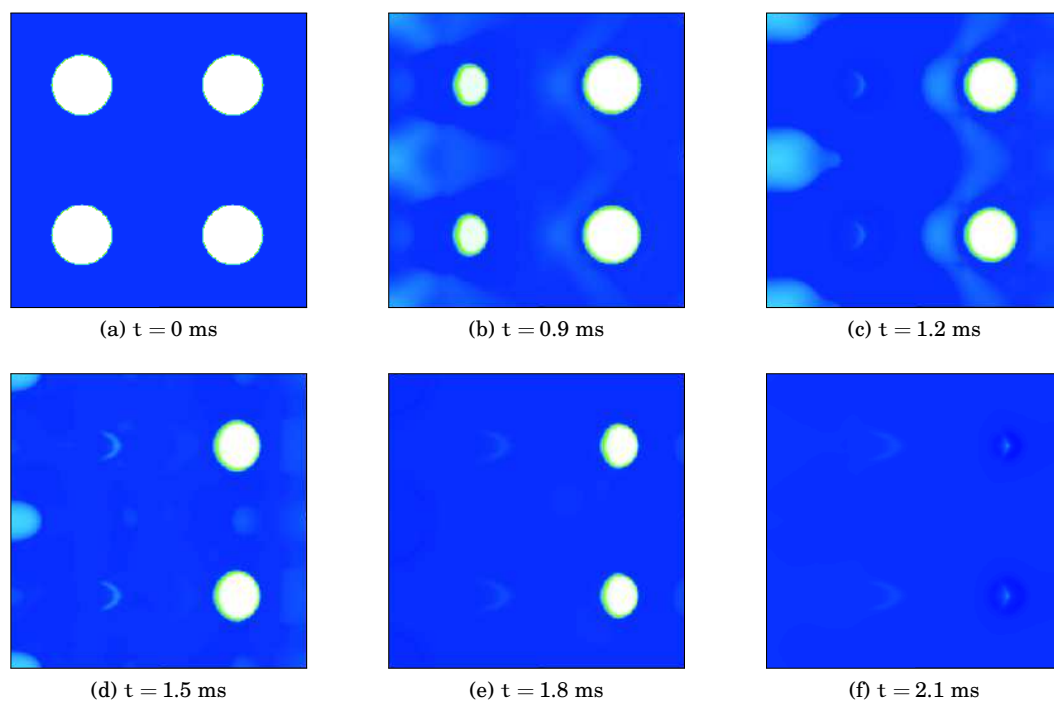


FIG. 10.25.: Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test 10.2.2

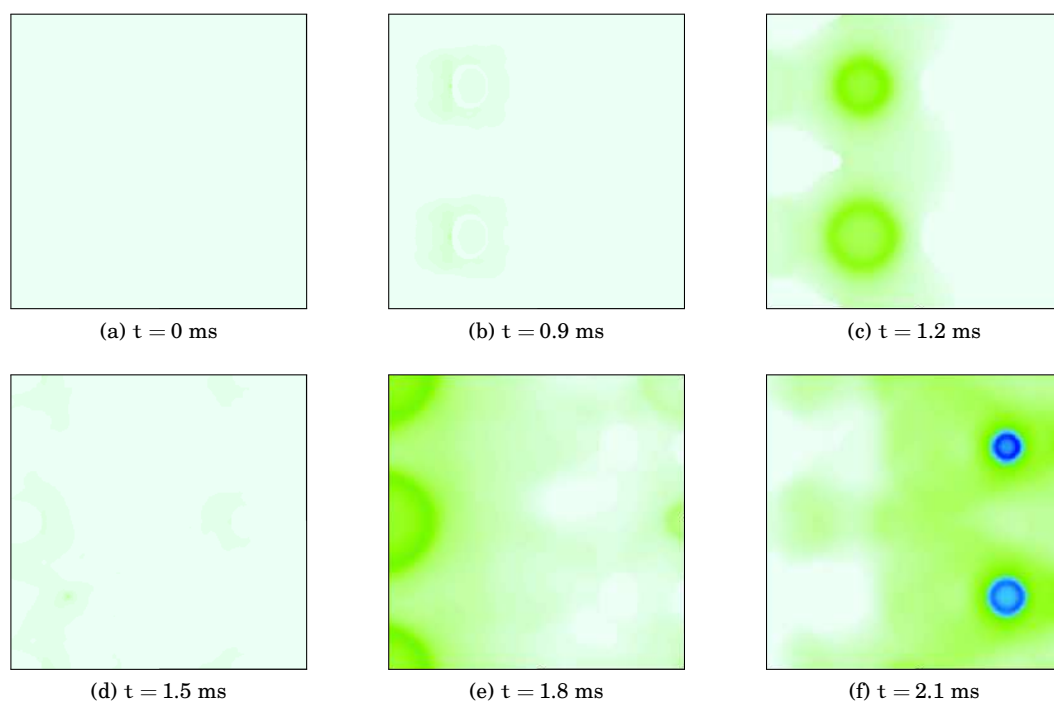


FIG. 10.26.: Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test 10.2.2

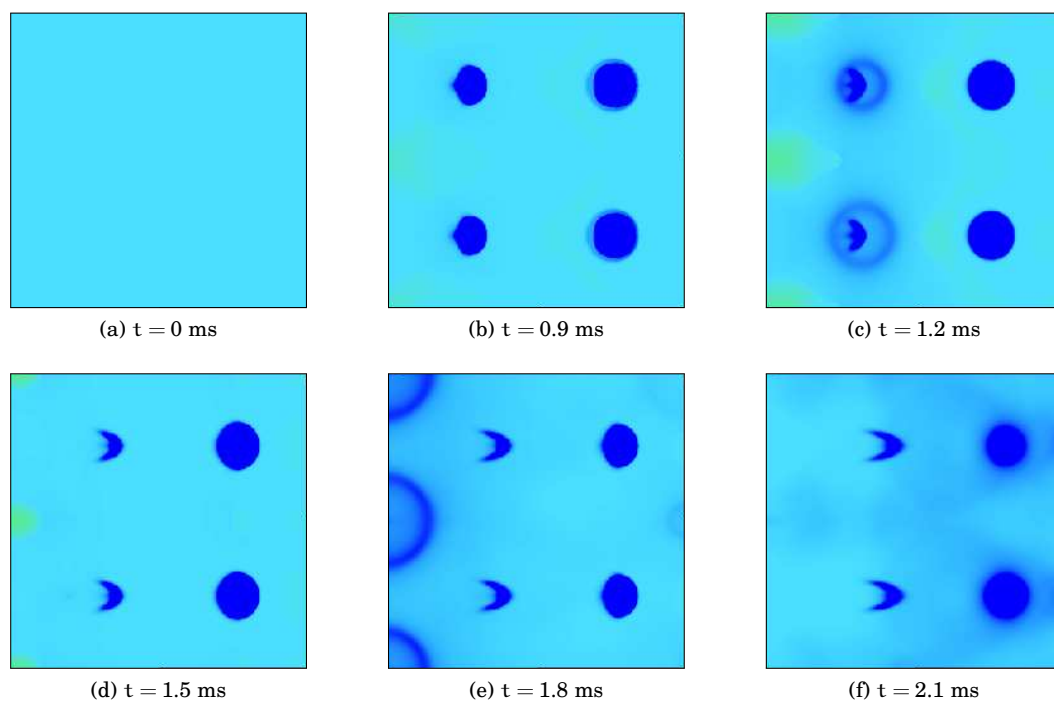


FIG. 10.27.: Évolution en temps du profil de la température T pour le cas test 10.2.2.

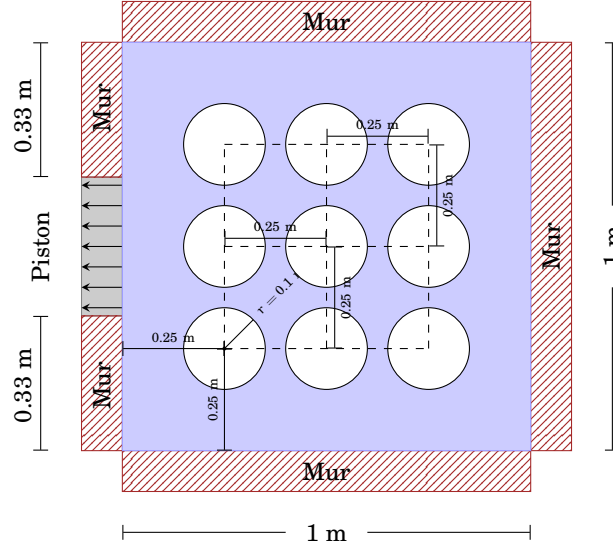


FIG. 10.28.: Géométrie du cas test 10.2.3

10.2.3. Dépression de neuf bulles de vapeur

On considère un domaine carré de 1 m de côté discrétisé sur une grille de 100×100 mailles. Neuf bulles de vapeur d'eau sont positionnées comme en figure 10.28 et entourées par de l'eau liquide. Le rayon initial de chaque bulle est $r = 0.1$ m.

Les deux phases sont décrites par deux lois d'état de type *stiffened gas* dont les coefficients ont été donnés au tableau 6.3 et la loi de changement de phase est celle établie au chapitre 6.

La température initiale est fixée à $T_0 = 439$ K et le fluide est initialement au repos ($\mathbf{u}_0 = \mathbf{0}$) dans tout le domaine. À l'instant $t = 0$ s les deux phases sont à saturation donc les densités du liquide ρ_{liq} et de la vapeur ρ_{vap} valent respectivement $\rho_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_0) \approx 929.7941874$ kg/m³, $\rho_{\text{vap}}^{\text{sat}}(T_0) \approx 4.091902657$ kg/m³ et la pression est égale à $P = P^{\text{sat}}(T_0) \approx 8.034337432 \times 10^5$ Pa pour les deux phases.

Pour créer une dépression artificielle, on suppose que sur le côté gauche du domaine il y a un piston qui se déplace de la droite vers la gauche. Cette fois-ci le piston n'occupe pas toute la paroi mais seulement le tiers central comme dans la figure 10.28. Cette décompression est modélisée en imposant une vitesse constante $u_p = -1000$ m/s dans les mailles fictives centrales de la paroi gauche. Toutes les autres conditions aux limites sont des conditions de type mur. Le flux de masse est donc nul sur tous les bords du domaine.

Résultats et discussion

Les figures 10.29-10.30-10.31-10.32 montrent respectivement l'évolution temporelle de la fraction volumique z , de la densité ρ , de la pression P et de la température T dans l'intervalle de temps $t = 0$ ms, $t = 10$ ms.

Le mouvement du piston génère une dépression : puisque la pression diminue, le liquide s'évapore.

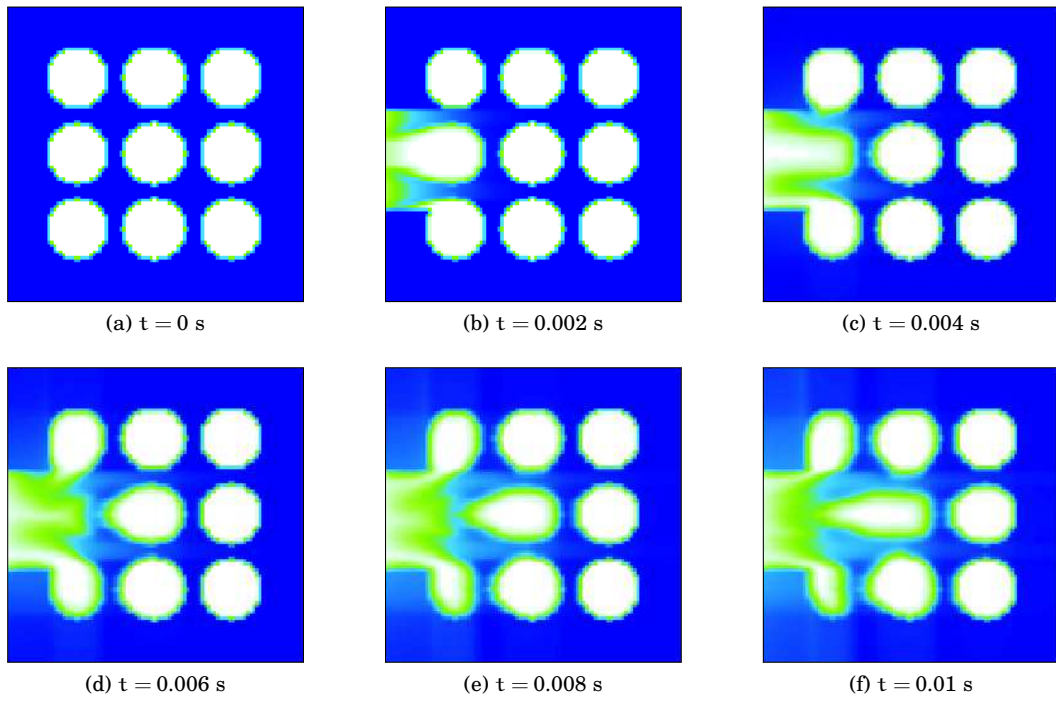


FIG. 10.29.: Évolution en temps du profil de la fraction volumique z pour le cas test 10.2.3.

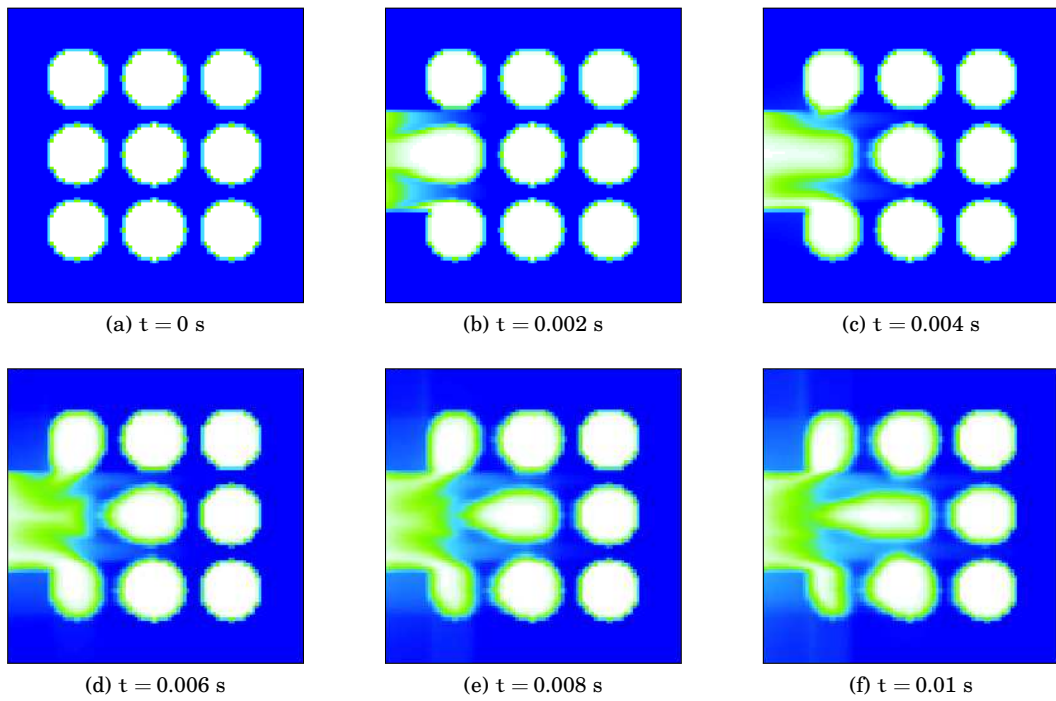


FIG. 10.30.: Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test 10.2.3

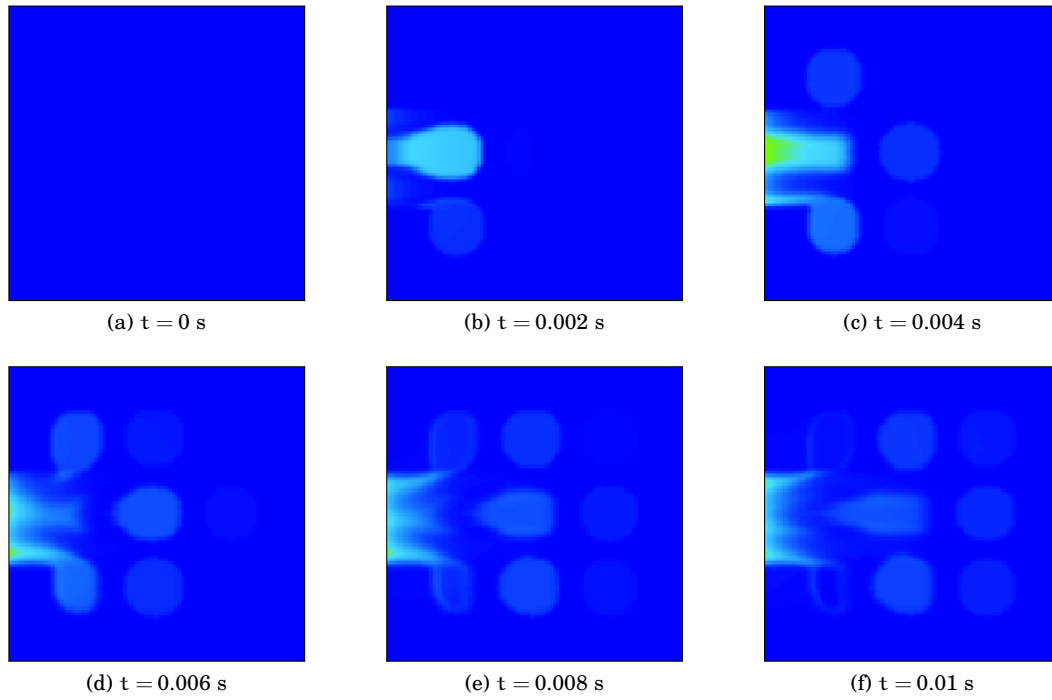


FIG. 10.31.: Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test 10.2.3.

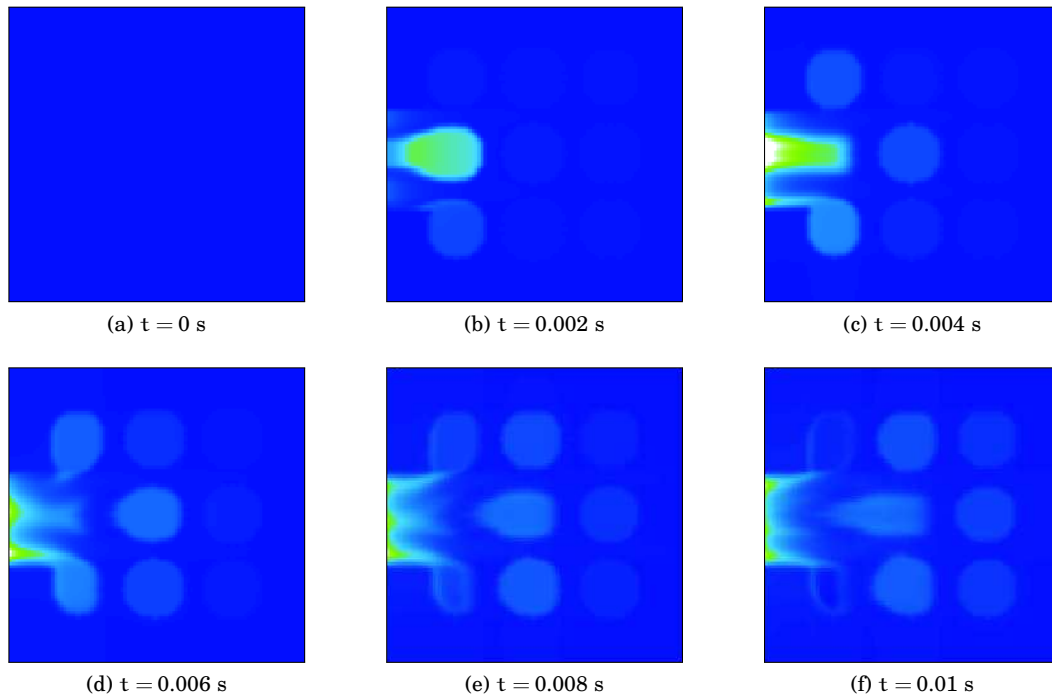


FIG. 10.32.: Évolution en temps du profil de la température T pour le cas test 10.2.3.

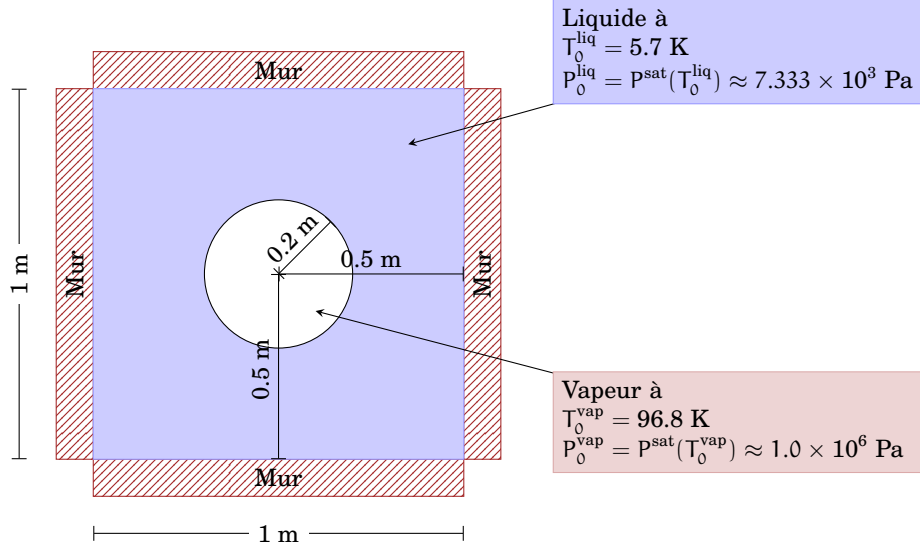


FIG. 10.33.: Géométrie du cas test 10.2.4

10.2.4. Surchauffage d'une bulle de vapeur dans du liquide

On considère un domaine carré de 1 m de coté discrétisé sur une grille de 200×200 mailles. On plonge une bulle de vapeur au centre du domaine comme en figure 10.33 entourée par du liquide. Le rayon initial de la bulle est $r = 0.2 \text{ m}$.

Les deux phases sont décrites par deux lois d'état de type *stiffened gas* simplifié dont les coefficients ont été donnés au tableau 6.2 et la loi de changement de phase est celle établie au chapitre 6. Les conductivités thermiques sont respectivement de $\vartheta_{liq} = 67.8 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}$ et $\vartheta_{vap} = 4.24 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}$ et la tension de surface est de 7 N/m .

La température initiale du liquide est fixée à $T_0^{liq} = 5.7 \text{ K}$ et celle de la vapeur à $T_0^{vap} = 96.8 \text{ K}$. Le fluide est initialement au repos ($\mathbf{u}_0 = \mathbf{0}$) dans tout le domaine. À l'instant $t = 0 \text{ s}$ le liquide est à saturation à la température T_0^{liq} tandis que la vapeur est à saturation à la température T_0^{vap} , donc la densité du liquide ρ_{liq} et de la vapeur ρ_{vap} valent respectivement $\rho_{liq}^{sat}(T_0^{liq}) \approx 58.70 \text{ kg/m}^3$, $\rho_{vap}^{sat}(T_0^{vap}) \approx 31.29 \text{ kg/m}^3$ et la pression est égale à $p^{liq} = p^{sat}(T_0^{liq}) \approx 7.333 \times 10^3 \text{ Pa}$ pour le liquide et $p^{vap} = p^{sat}(T_0^{vap}) \approx 1.0 \times 10^6 \text{ Pa}$ pour la vapeur.

Résultats et discussion

Les figures 10.34, 10.35, 10.36, 10.37 et 10.38 montrent respectivement les comparaisons des profils de la fraction de volume z , de la fraction de masse y , de la densité ρ , de la pression P et de la température T aux instants $t = 0.005 \text{ s}$ et $t = 0.010 \text{ s}$ obtenus sans et avec changement de phase.

On remarque que la température obtenue avec le changement de phase à l'intérieur de la bulle est supérieure à celle obtenue sans changement de phase car une partie de l'énergie est utilisée justement pour changer de phase. De plus, la vapeur étant initialisée à saturation, on remarque immédiatement le début de liquéfaction dû à la dépression qui se crée.

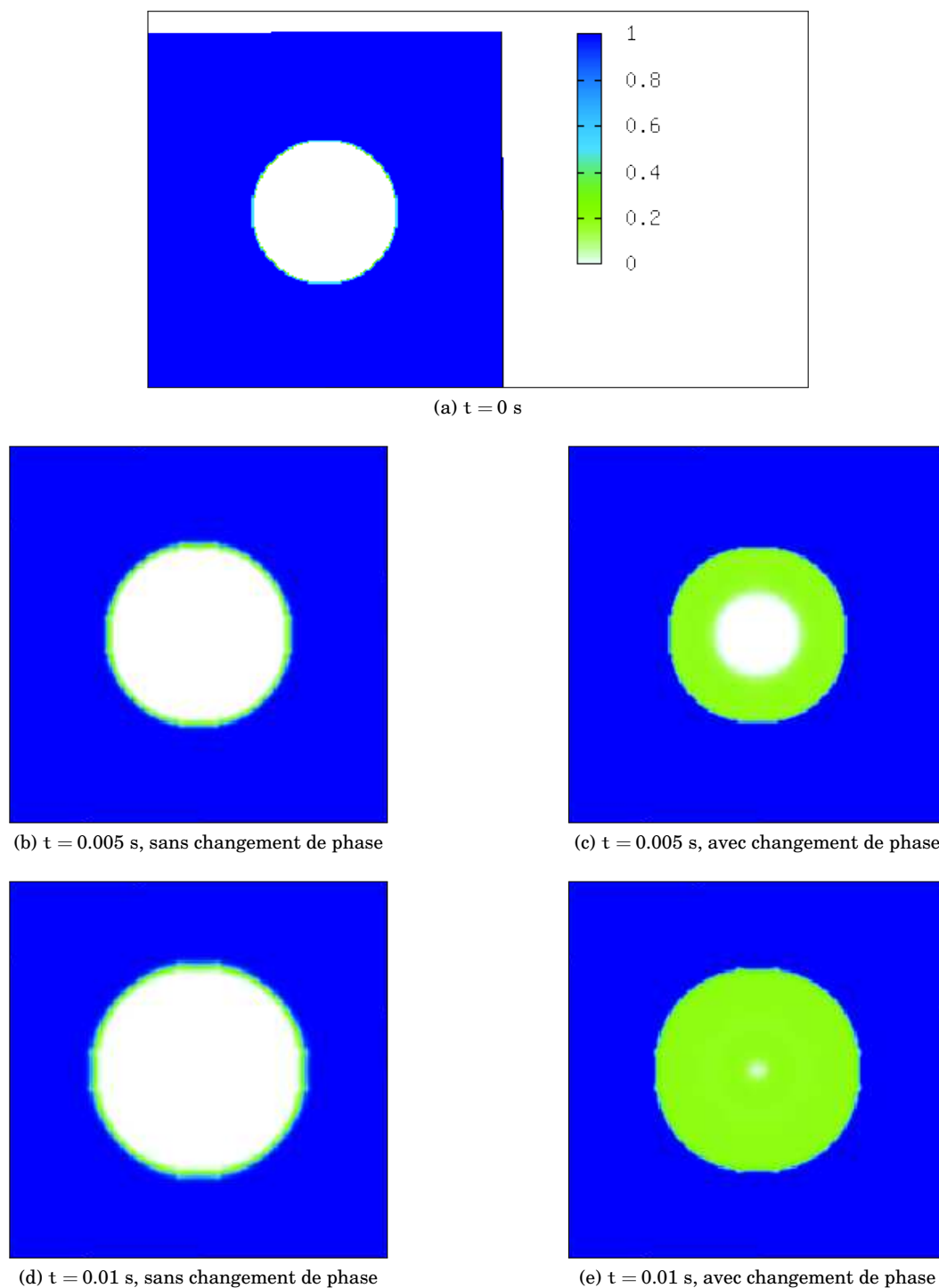
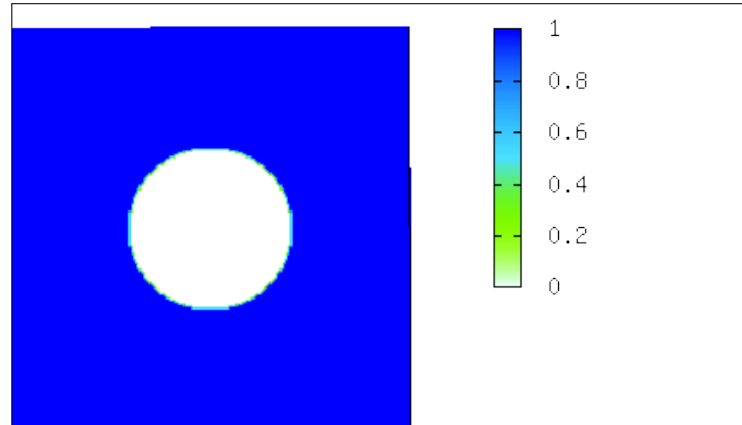
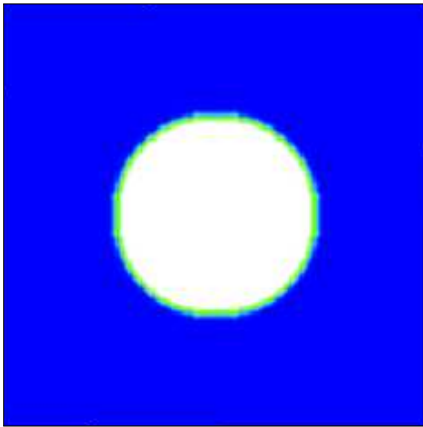


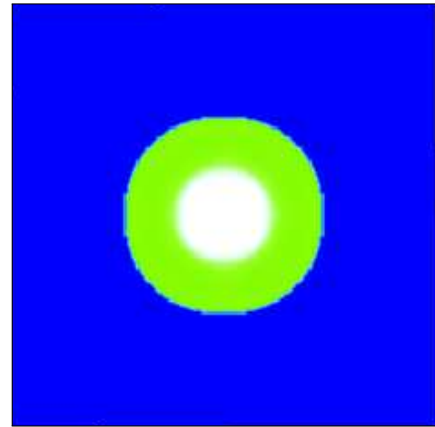
FIG. 10.34.: Comparaison des profils de la fraction volumique z obtenus sans et avec changement de phase pour le cas test 10.2.4



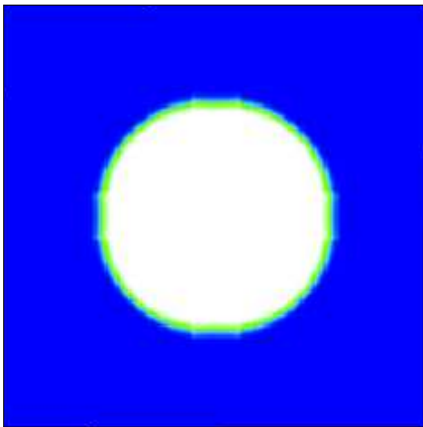
(a) $t = 0$ s



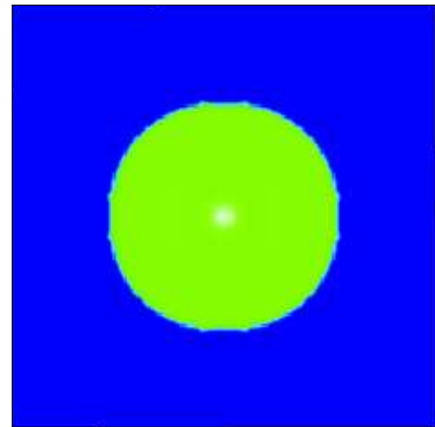
(b) $t = 0.005$ s, sans changement de phase



(c) $t = 0.005$ s, avec changement de phase



(d) $t = 0.01$ s, sans changement de phase



(e) $t = 0.01$ s, avec changement de phase

FIG. 10.35.: Comparaison des profils de la fraction de masse y obtenus sans et avec changement de phase pour le cas test 10.2.4

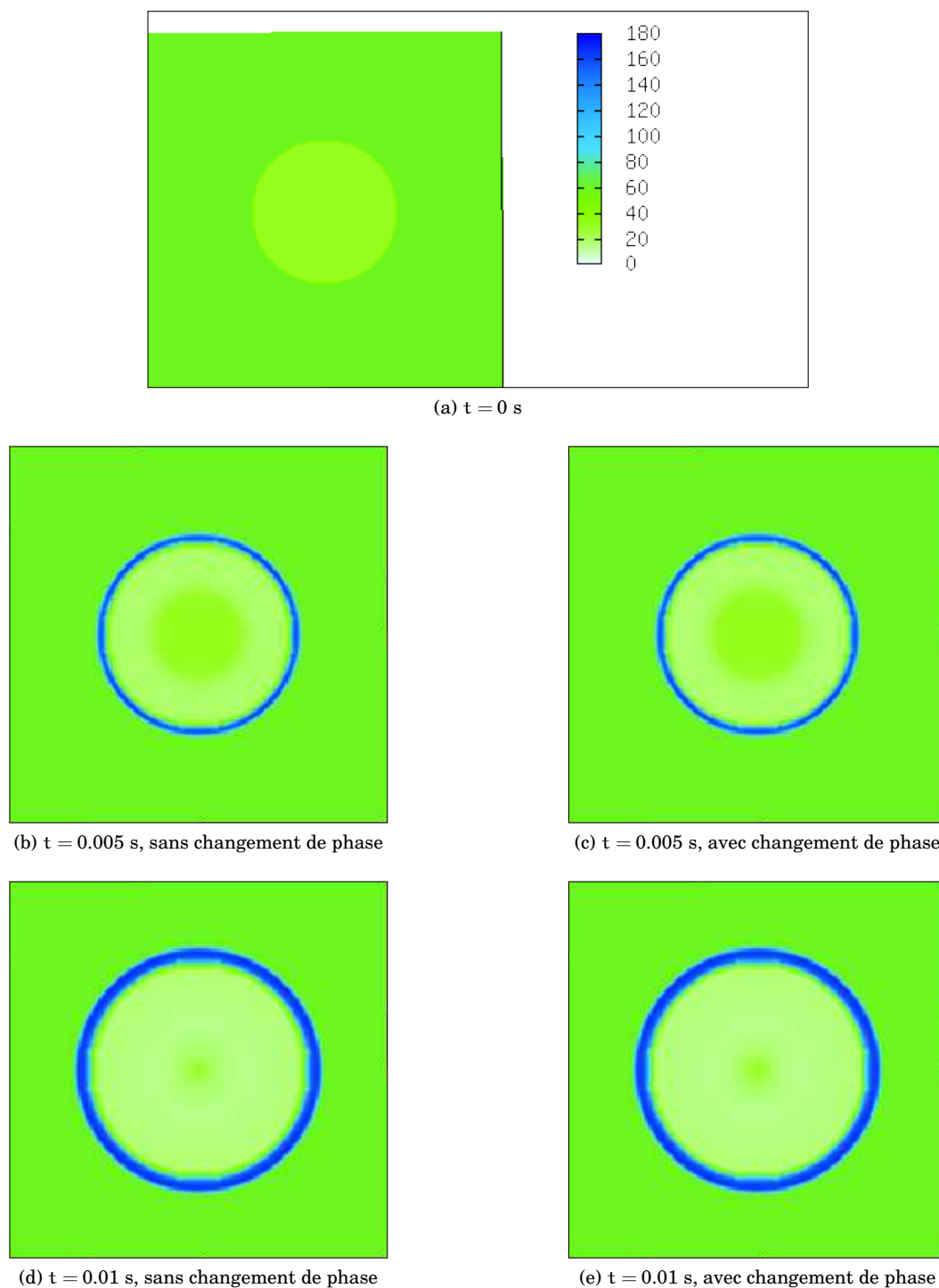


FIG. 10.36.: Comparaison des profils de la densité ρ obtenus sans et avec changement de phase pour le cas test 10.2.4

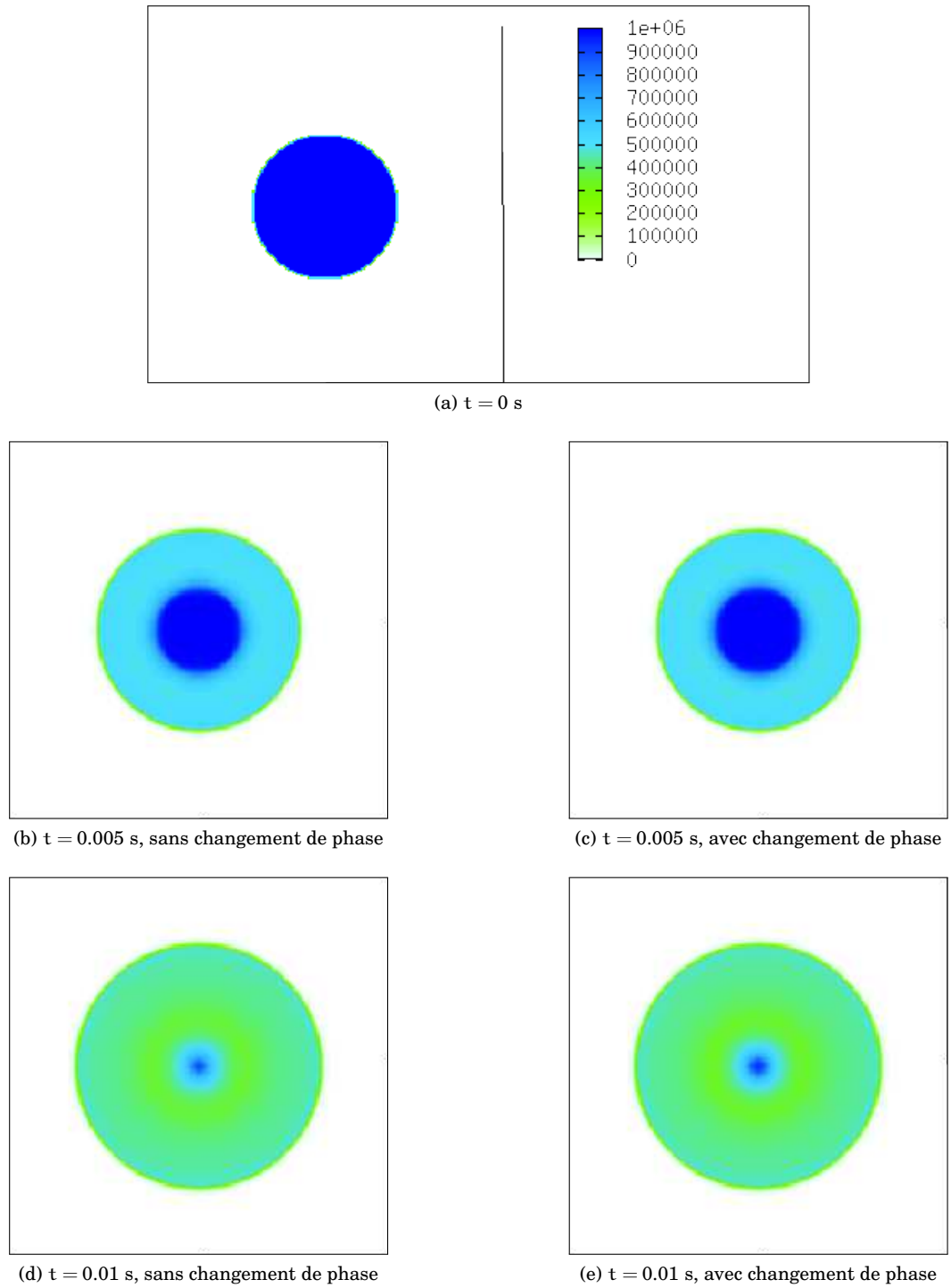
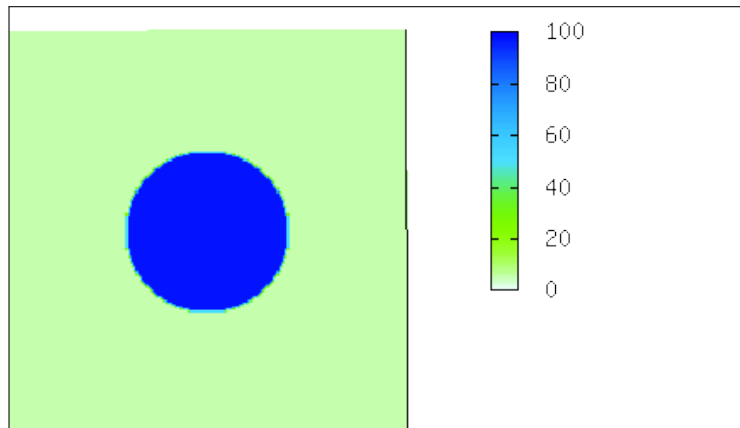
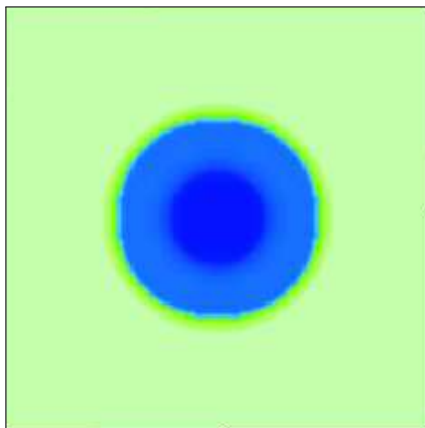


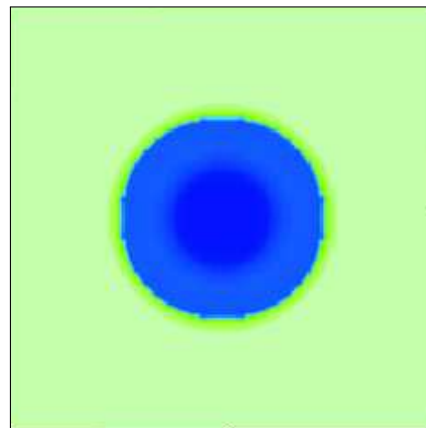
FIG. 10.37.: Comparaison des profils de la pression P obtenus sans et avec changement de phase pour le cas test 10.2.4



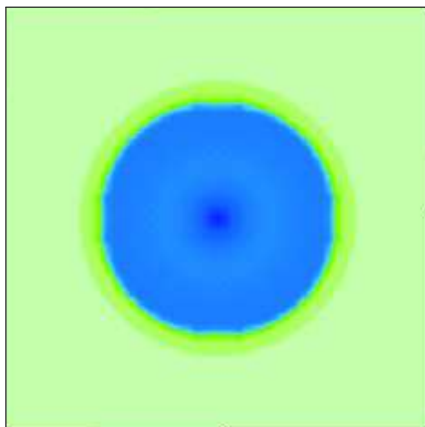
(a) $t = 0$ s



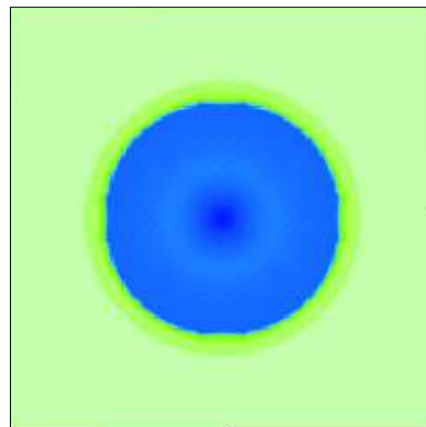
(b) $t = 0.005$ s, sans changement de phase



(c) $t = 0.005$ s, avec changement de phase



(d) $t = 0.01$ s, sans changement de phase



(e) $t = 0.01$ s, avec changement de phase

FIG. 10.38.: Comparaison des profils de la température T obtenus sans et avec changement de phase pour le cas test 10.2.4

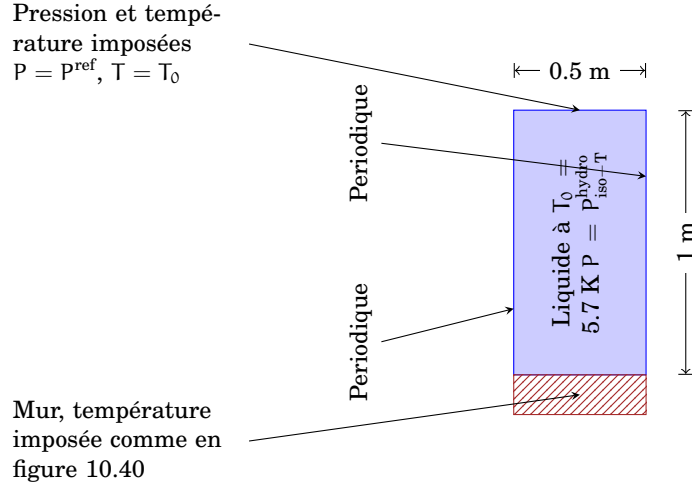


FIG. 10.39.: Géométrie du cas test 10.2.5

10.2.5. Nucléation d'une bulle de vapeur à contact d'une paroi chauffée

On considère maintenant un problème d'ébullition en paroi où la paroi inférieure est chauffée à température constante dans le temps et où la paroi supérieure est maintenue dans des conditions de pression et température imposées.

Le système étudié est représenté à la figure 10.39 : un domaine de 0.5 m de large sur 1 m de haut discrétisé sur une grille de 100×200 mailles régulières carrées est initialement rempli d'un fluide à l'état liquide.

Les propriétés physiques du fluide sont décrites par une loi de type *stiffened gas* simplifiée dont les paramètres ont été donnés au tableau 6.2 et la loi de changement de phase est celle établie au chapitre 6. Les conductivités thermiques sont respectivement $\vartheta_{\text{liq}} = 67.8 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ et $\vartheta_{\text{vap}} = 4.24 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ et la tension de surface est de 4 N/m .

La température initiale dans tout le liquide est fixée à $T_0 = 5.7 \text{ K}$ et le fluide est initialement au repos ($\mathbf{u}_0 = \mathbf{0}$) dans tout le domaine. À l'instant $t = 0 \text{ s}$ le liquide est initialisé à la pression hydrostatique à partir d'une pression de référence, à savoir $P^{\text{ref}} = 8 \times 10^3 \text{ Pa} > P^{\text{sat}}(T_0) \approx 7.333 \times 10^3 \text{ Pa}$. Pour les détails voir plus bas le paragraphe qui décrit ce type d'initialisation.

Du point de vue des *conditions aux limites pour la dynamique*, les parois latérales ont des conditions de type périodiques, la paroi inférieure de type mur tandis que sur la paroi supérieure on impose une pression fixée à la pression de référence utilisée pour l'initialisation hydrostatique et une température fixée à une température de référence, à savoir $T^{\text{ref}} = T_0 = 5.7 \text{ K}$. Le flux de masse est nul sur tous les bords du domaine.

Pour créer un changement de phase, la paroi inférieure est chauffée par une température imposée et on considère une gravité de $\bar{g} = 100 \text{ m/s}^2$. Donc, du point de vue de la *thermique*, les *conditions aux limites* sont les suivantes : un flux nul sur les parois latérales, une température imposée sur la paroi supérieure égale à la température de

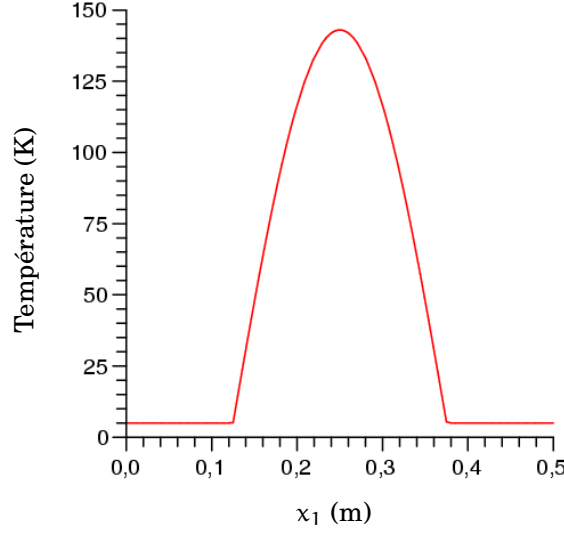


FIG. 10.40.: Profil de la température $T(x_1, x_2)$ imposée au niveau de la paroi $x_2 = 0$ pour le cas test 10.2.5

référence T^{ref} et une température imposée sur la paroi inférieure selon la loi

$$T(x_1, x_2 = 0) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} T_i + (T_s - T_i) \sin(4\pi(x_1 - 0.125)), & \text{si } \sin(4\pi(x_1 - 0.125)) > 0, \\ T_i, & \text{sinon,} \end{cases}$$

avec $T_i = 5.7$ K et $T_s = 143$ K (voir figure 10.40).

On utilise le schéma au *deuxième ordre en espace et en temps* auquel on a ajouté la gravité, la tension de surface ainsi que la diffusion de la chaleur.

Condition initiale : pression hydrostatique isotherme Le domaine est rempli intégralement par la phase liquide qui est à une température $T = T_0$ uniforme. Dans les mailles en haut du domaine (i.e. pour $x_1 \in [0 \text{ m}, L_1 \stackrel{\text{def}}{=} 0.5 \text{ m}]$ et $x_2 = L_2 \stackrel{\text{def}}{=} 1 \text{ m}$) on impose la valeur de la pression à une valeur de référence P^{ref} , en l'occurrence ici $P^{\text{ref}} \stackrel{\text{def}}{=} 8 \times 10^3 \text{ Pa} > P^{\text{sat}}(T_0) \approx 7.333 \times 10^3 \text{ Pa}$ et elle est la même utilisée pour la condition au bord sur la paroi nord.

La pression $(x_1, x_2) \mapsto p^{\text{hydro}}$ dans le reste du domaine n'est pas constante mais elle est obtenue par intégration le long de la verticale de l'EDO

$$\left. \frac{\partial p^{\text{hydro}}(x_1, x_2)}{\partial x_2} \right|_{x_1} = -\rho(x_1, x_2) \tilde{g} = -\frac{\tilde{g}}{\Gamma_{\text{liq}} c_{v\text{liq}}} \frac{p^{\text{hydro}}(x_1, x_2) + \pi_{\text{liq}}}{T_0}$$

qui donne

$$p^{\text{hydro}}(x_1, x_2) = -\pi_{\text{liq}} + (P^{\text{ref}} + \pi_{\text{liq}}) \exp\left(-\frac{\tilde{g}}{\Gamma_{\text{liq}} c_{v\text{liq}} T_0} (x_2 - L_2)\right)$$

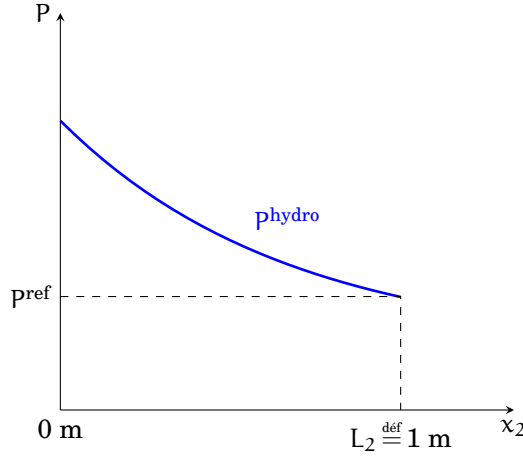


FIG. 10.41.: Condition initiale : pression hydrostatique isotherme pour le cas test 10.2.5

(voir la figure 10.41). La densité et l'énergie sont ensuite calculées en fonction de T^{ref} et de $P^{\text{hydro}}(x_1, x_2)$ et donc varient en fonction de la position le long de la verticale. Le liquide n'est donc pas à saturation car $\rho_{\text{liq}}(P^{\text{hydro}}(x_1, x_2), T_0)$ est toujours supérieure à $\rho_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_0) \approx 58.706 \text{ kg/m}^3$ et de même pour l'énergie.

Résultats et discussion

Les résultats de cette simulation sont illustrés aux figures 10.42, 10.43, 10.44, 10.45 et 10.46 qui représentent respectivement l'évolution spatio-temporelle de la fraction de volume z , de la fraction de masse y , de la densité ρ , de la pression P et du champ de température T dans l'intervalle de temps $t = 0 \text{ s}$, $t = 1 \text{ s}$.

Grâce au profil de la température imposée au niveau de la paroi sud, on observe la nucléation d'une bulle de vapeur au niveau du maximum de la température. Initialement elle grossit sous l'effet du changement de phase, puis elle se déforme peu à peu sous l'effet de la gravité jusqu'au détachement. On remarque la très faible épaisseur de la zone de mélange. Insistons sur le fait que la gestion de l'interface ainsi que la rupture de l'interface au détachement sont directement inclus dans le modèle et ne nécessitent aucun traitement particulier (notamment, aucun critère de détachement ni de contrôle de l'épaisseur de l'interface est introduit dans le modèle). On observe que le détachement se fait non pas à la paroi mais de sorte qu'un résidu de vapeur reste à la paroi. Ce phénomène peut être expliqué par la compétition entre le mouvement convectif de part et d'autre de la bulle qui tendent à rapprocher les deux branches de l'interface (aidé par la tension de surface) et la forte évaporation au voisinage de la paroi. Ce phénomène, déjà remarqué par Fouillet [37, p. 79], est d'ailleurs conforme aux observations expérimentales. Après le détachement, la bulle, toujours sous l'effet de la gravité, monte vers le haut du domaine. La température de cette bulle étant supérieure à celle du liquide l'entourant (voir figure 10.46 à la page 330), elle se refroidit et par conséquent elle liquéfie.

Ces observations sont qualitativement en accord avec l'expérience. On peut donc conclure que le modèle étudié permet, au moins qualitativement, de simuler la croissance sur une paroi chauffée et le détachement de plusieurs bulles successivement. D'autres simulations qui permettraient d'étudier l'influence de la variation des paramètres ou de l'introduction de nouveaux paramètres (viscosité et angle de contact par exemple) peuvent être envisagées pour une étude plus approfondie par exemple de la taille des bulles et de la fréquence de détachement.

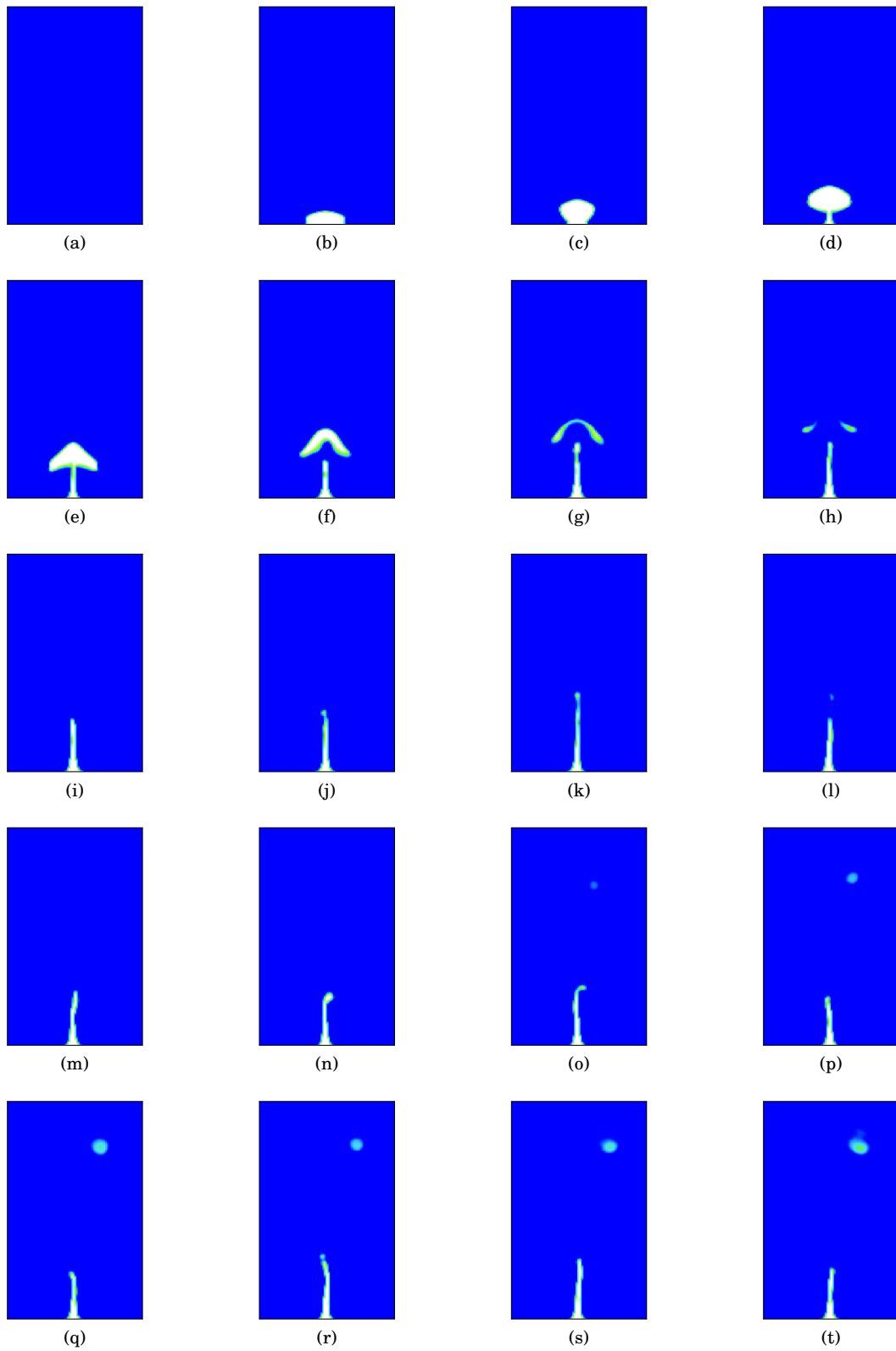


FIG. 10.42.: Évolution en temps du profil de la fraction volumique z pour le cas test 10.2.5.

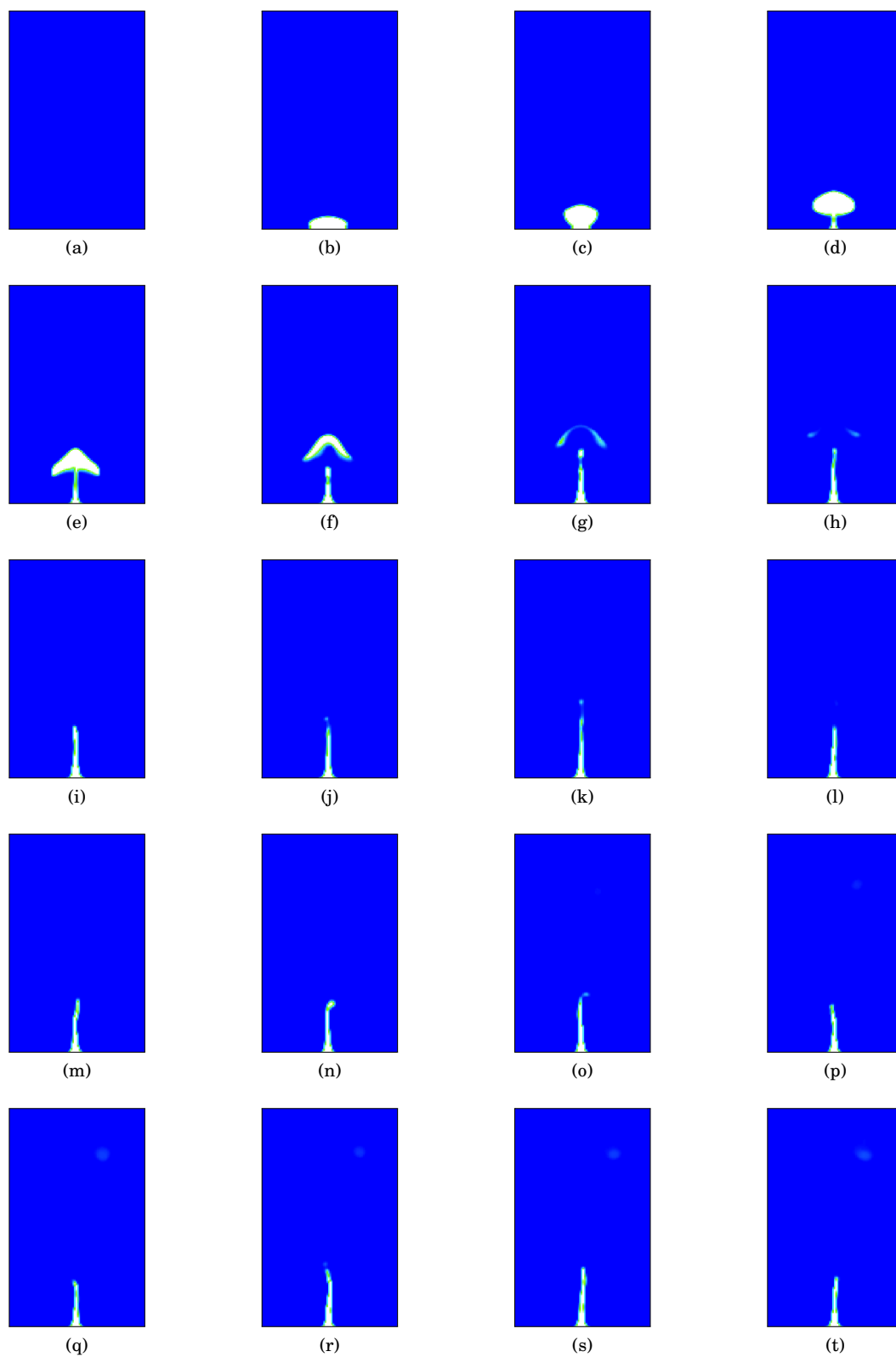


FIG. 10.43.: Évolution en temps du profil de la fraction de masse y pour le cas test 10.2.5.

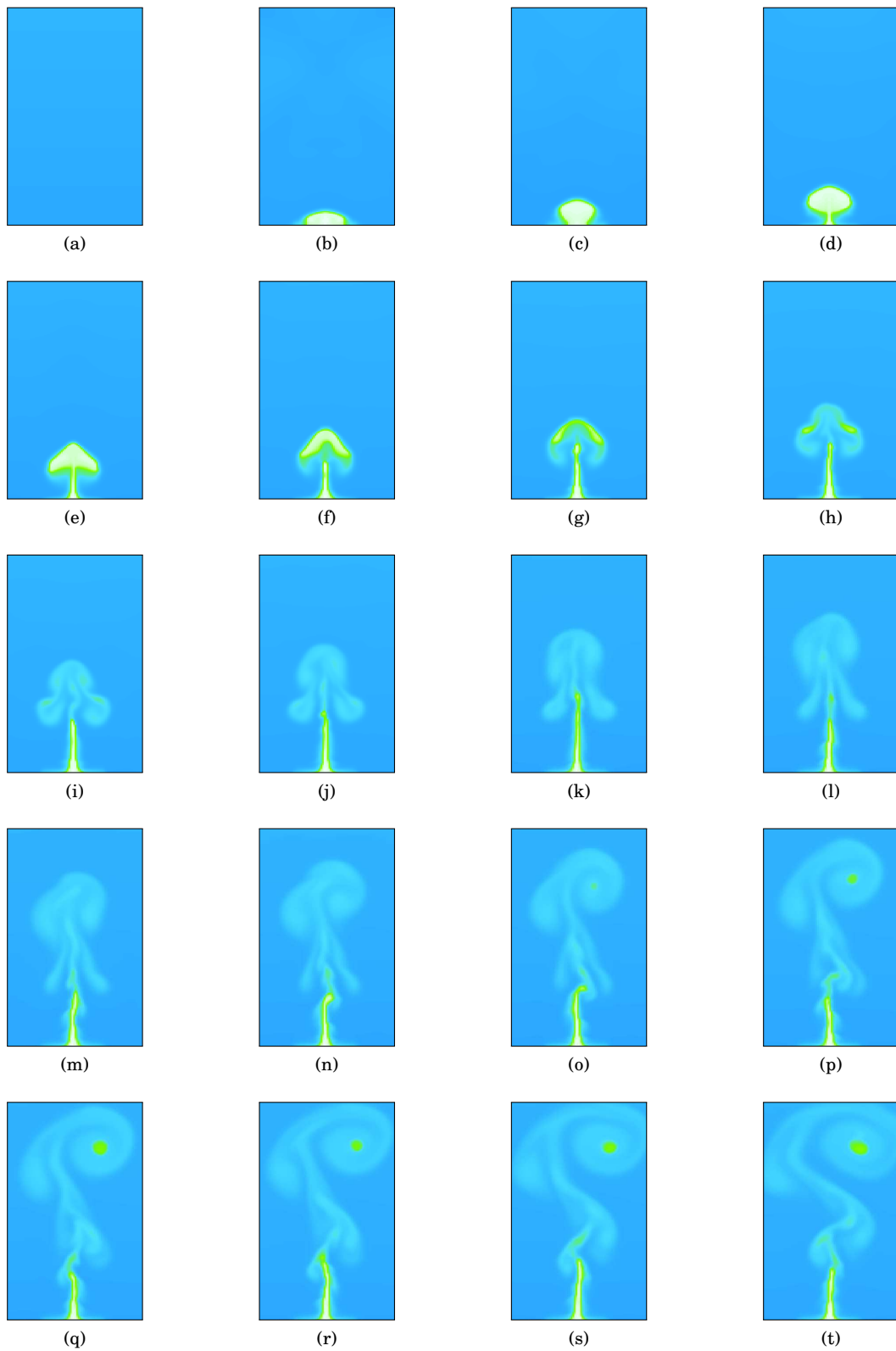


FIG. 10.44.: Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test 10.2.5

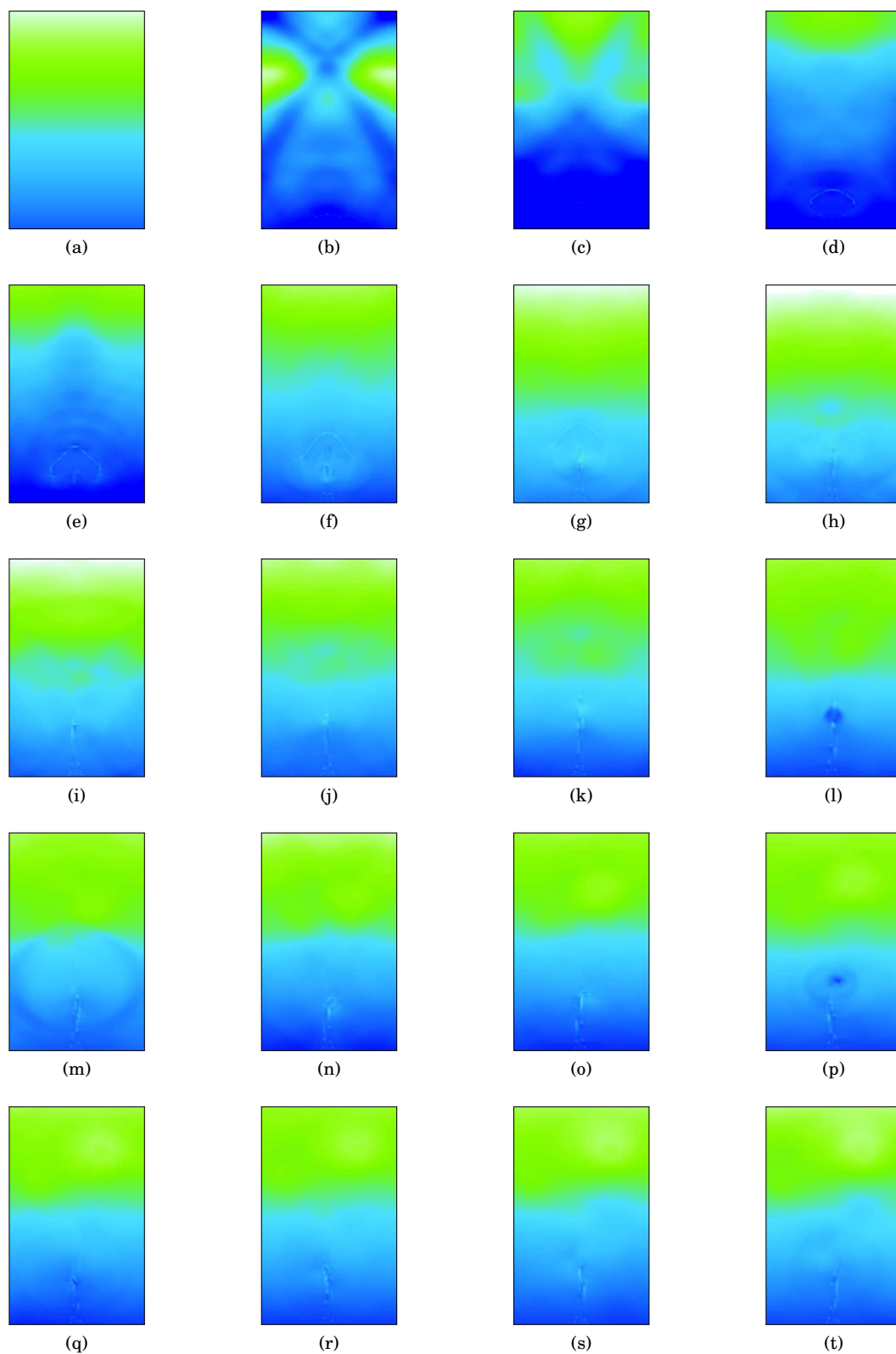


FIG. 10.45.: Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test 10.2.5.



FIG. 10.46.: Évolution en temps du profil de la température T pour le cas test 10.2.5.

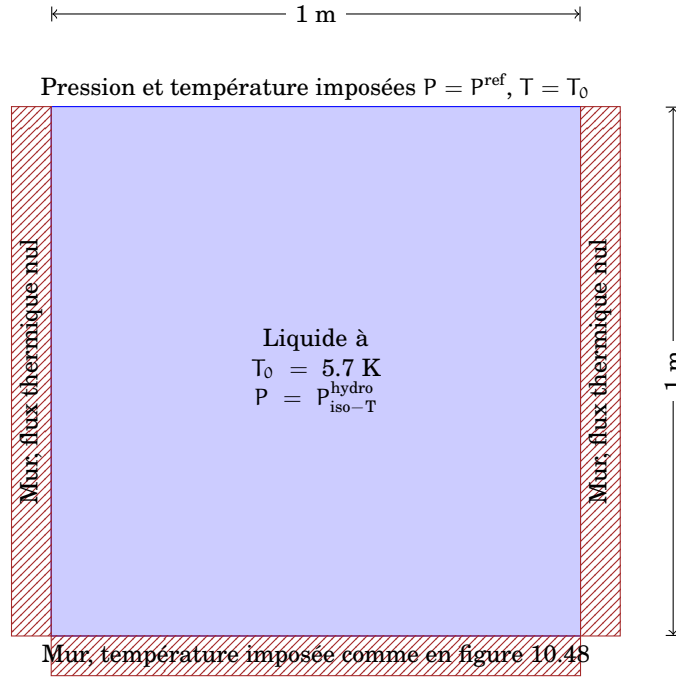


FIG. 10.47.: Géométrie du cas test 10.2.6

10.2.6. Nucléation de bulles de vapeur à contact d'une paroi chauffée

On veut maintenant généraliser le cas test précédent à la simulation numérique d'un problème d'ébullition en paroi où la paroi inférieure est chauffée à température constante dans le temps et où la paroi supérieure est maintenue dans des conditions de pression imposée.

Le système étudié est représenté à la figure 10.47 : un domaine carré de 1 m de coté discrétisé sur une grille de 100×100 mailles régulières carrées est initialement rempli d'un fluide à l'état liquide.

Les propriétés physiques du fluide sont décrites par une loi de type *stiffened gas* simplifiée dont les paramètres ont été donnés au tableau 6.2 à la page 169 et la loi de changement de phase est celle établie au chapitre 6. Les conductivités thermiques sont respectivement de $\vartheta_{\text{liq}} = 67.8\text{ W/(m} \cdot \text{K)}$ et $\vartheta_{\text{vap}} = 4.24\text{ W/(m} \cdot \text{K)}$ et la tension de surface est de 7 N/m .

La température initiale est fixée à $T_0 = 5.7\text{ K}$ et le fluide est initialement au repos ($\mathbf{u}_0 = \mathbf{0}$) dans tout le domaine. À l'instant $t = 0\text{ s}$ le liquide n'est pas à saturation car on prend en compte la pression hydrostatique, donc la densité vaut $\rho_{\text{liq}} > \rho_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_0) \approx 58.7057826446336\text{ kg/m}^3$ et la pression dans le haut du domaine est égale à $P^{\text{ref}} = 8 \times 10^3\text{ Pa} > P^{\text{sat}}(T_0) \approx 7.333 \times 10^3\text{ Pa}$ et augmente au fur et à mesure que l'ordonnée diminue (pour les détails sur l'initialisation à la pression hydrostatique isotherme voir le paragraphe 10.2.5 à la page 323).

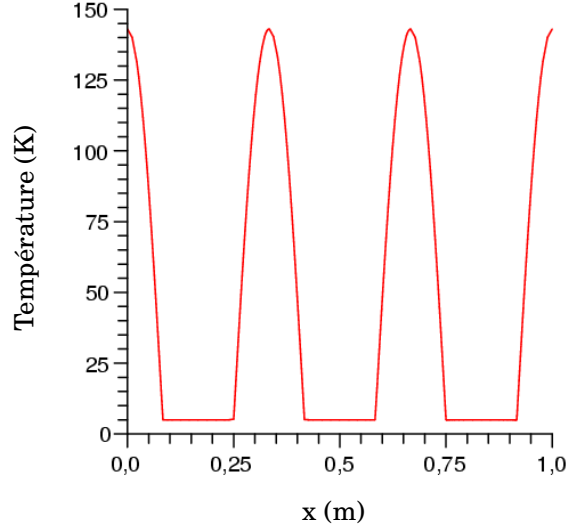


FIG. 10.48.: Profil de la température $T(x, y)$ imposée au niveau de la paroi $y = 0$ pour le cas test 10.2.6

Du point de vue de la *dynamique*, les parois latérales et inférieure ont des conditions aux limites de type mur tandis que sur la paroi supérieure on impose une pression fixée à la pression de référence supérieure à la pression de saturation initiale, à savoir $p = p^{\text{ref}} > p^{\text{sat}}(T_0) \approx 7.333 \times 10^3$ Pa. Le flux de masse est donc nul sur tous les bords du domaine.

Pour créer un changement de phase, la paroi inférieure est chauffée par une température imposée et on considère une gravité de $\tilde{g} = 100$ m/s². Donc, du point de vue de la *thermique*, les conditions aux limites sont les suivantes : un flux nul sur les parois latérales et supérieure et une température imposée sur la paroi inférieure (voir figure 10.48) selon la loi

$$T(x, y = 0) \stackrel{\text{déf}}{=} \begin{cases} T_i + (T_s - T_i) \cos(6\pi x), & \text{si } \cos(6\pi x) > 0, \\ T_i, & \text{sinon,} \end{cases}$$

avec $T_i = 5$ K et $T_s = 143$ K.

On utilise le *schéma au deuxième ordre en espace et en temps* auquel on a ajouté la gravité, la tension de surface ainsi que la diffusion de la chaleur.

Résultats et discussion

Les résultats de cette simulation sont illustrés aux figures 10.49, 10.50, 10.51, 10.52 et 10.53 qui représentent respectivement l'évolution spatio-temporelle de la fraction de volume z , de la fraction de masse y , de la densité ρ , de la pression P et du champ de température T dans l'intervalle de temps $t = 0$ s, $t = 0.6$ s.

Grâce au profil sinusoïdal de la température imposée à la paroi sud, on observe la nucléation de plusieurs bulles de vapeur au niveau des maxima de la température.

Comme pour le cas test précédent, initialement elles grossissent sous l'effet du changement de phase, puis elles se déforment peu à peu sous l'effet de la gravité jusqu'au détachement et elles montent vers le haut du domaine. La température de ces bulles étant supérieure à celle du liquide les entourant (voir figure 10.53 à la page 338), elles vont non seulement se refroidir et par conséquent liquéfier mais aussi réchauffer le liquide environnant. Ce réchauffement, combiné avec la source de chaleur imposée au niveau de la paroi, va ensuite créer une colonne de vapeur s'élevant grâce à la gravité. On note également l'apparition d'instabilités hydrodynamiques entre la phase vapeur en mouvement et la phase liquide immobile. Notons que les conditions aux limites sur le bord supérieur ne permettent pas à la bulle de sortir : la vapeur s'accumule dans la partie haute du domaine et le liquide continue à se réchauffer. Si on continue la simulation on obtient une vaporisation complète du liquide.

On observe aussi des courants parasites sur la partie haute du domaine générées par la tension de surface : les conditions au bord imparfaites créent un début de changement de phase le long de cette paroi et donc la tension de surface commence à agir. Pour cela on a donc répété le même cas test sans la tension de surface (voir le paragraphe 10.2.6.a à la page 339).

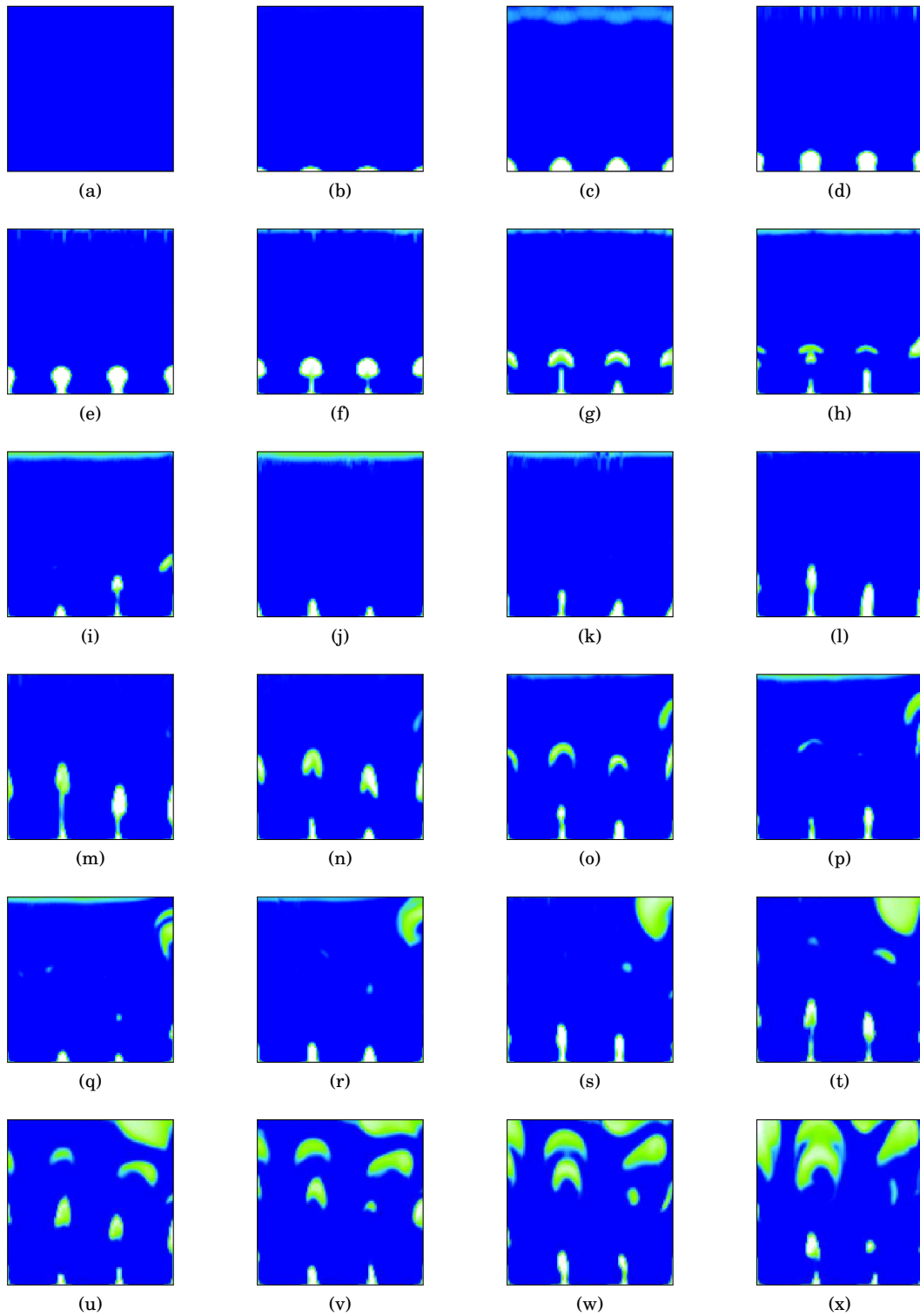


FIG. 10.49.: Évolution en temps du profil de la fraction volumique z pour le cas test 10.2.6.

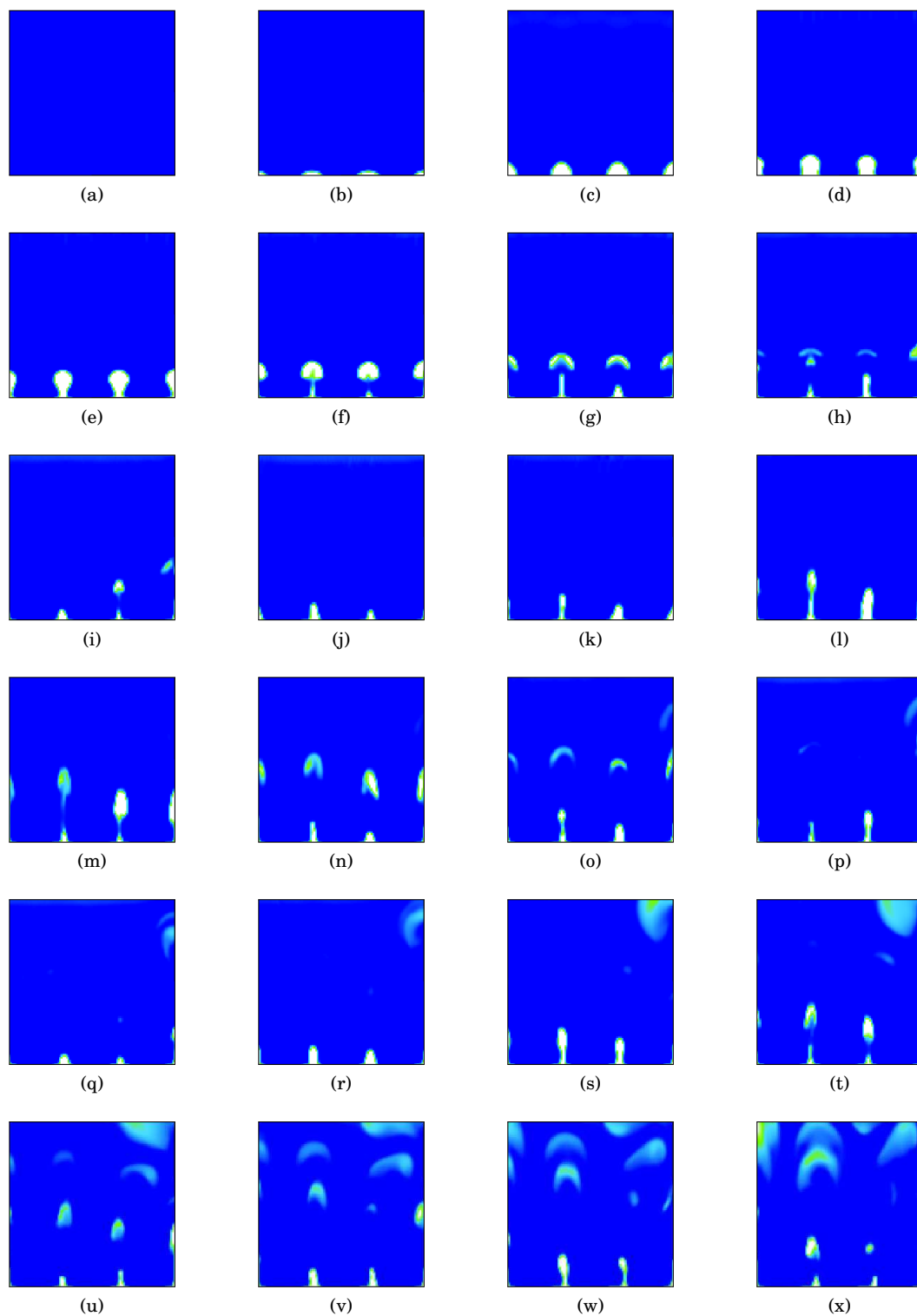


FIG. 10.50.: Évolution en temps du profil de la fraction de masse y pour le cas test 10.2.6.

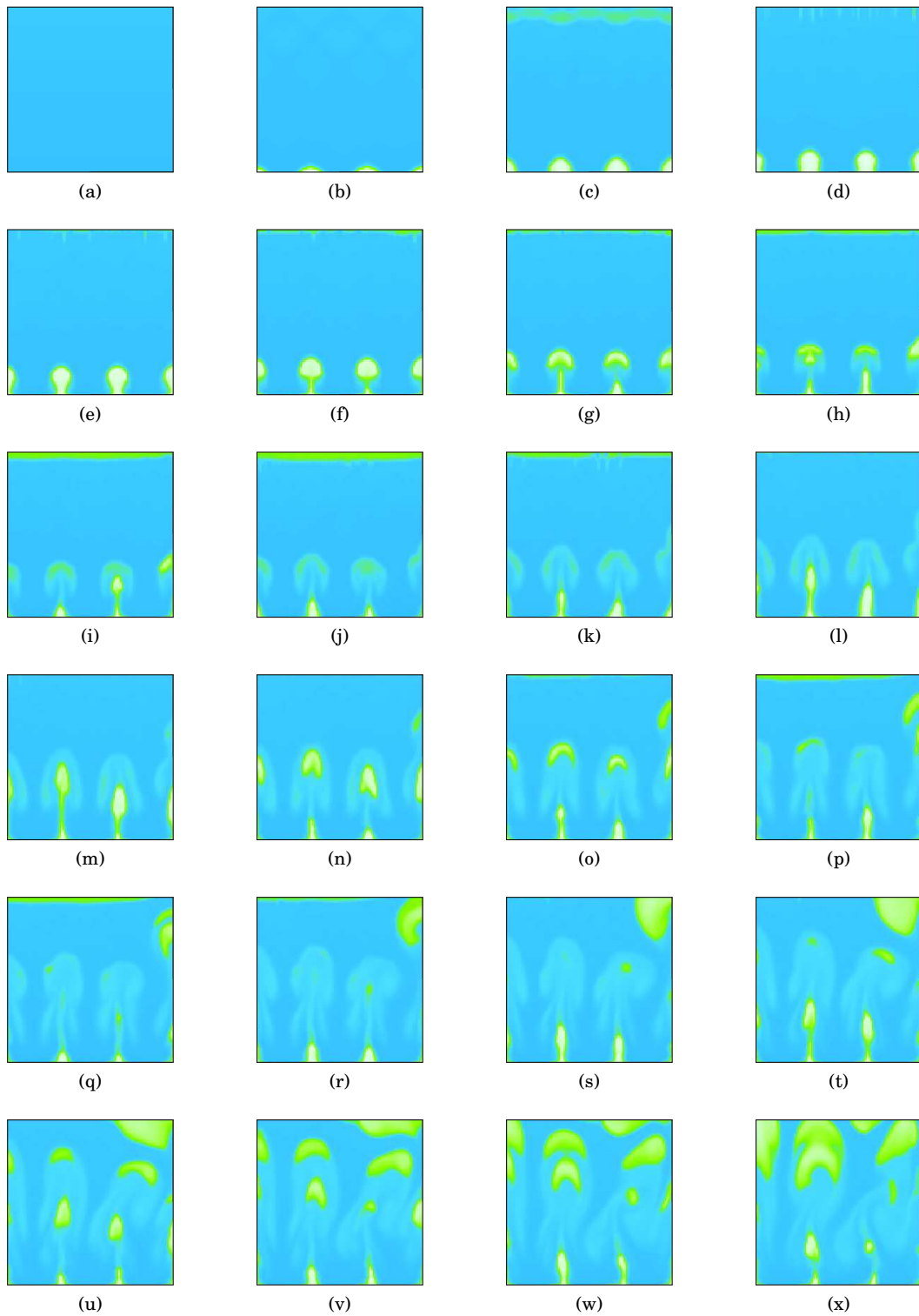


FIG. 10.51.: Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test 10.2.6

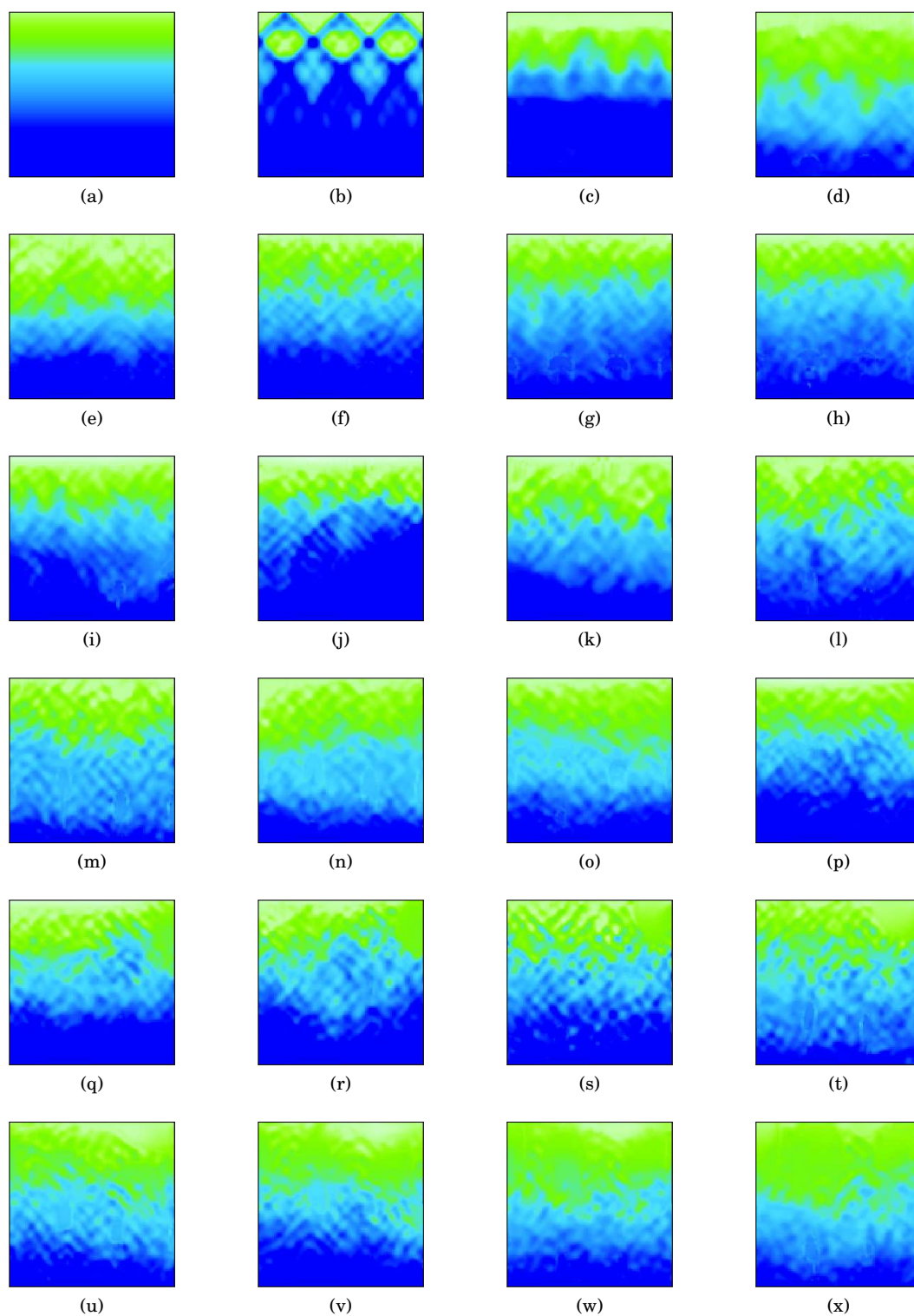


FIG. 10.52.: Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test 10.2.6.

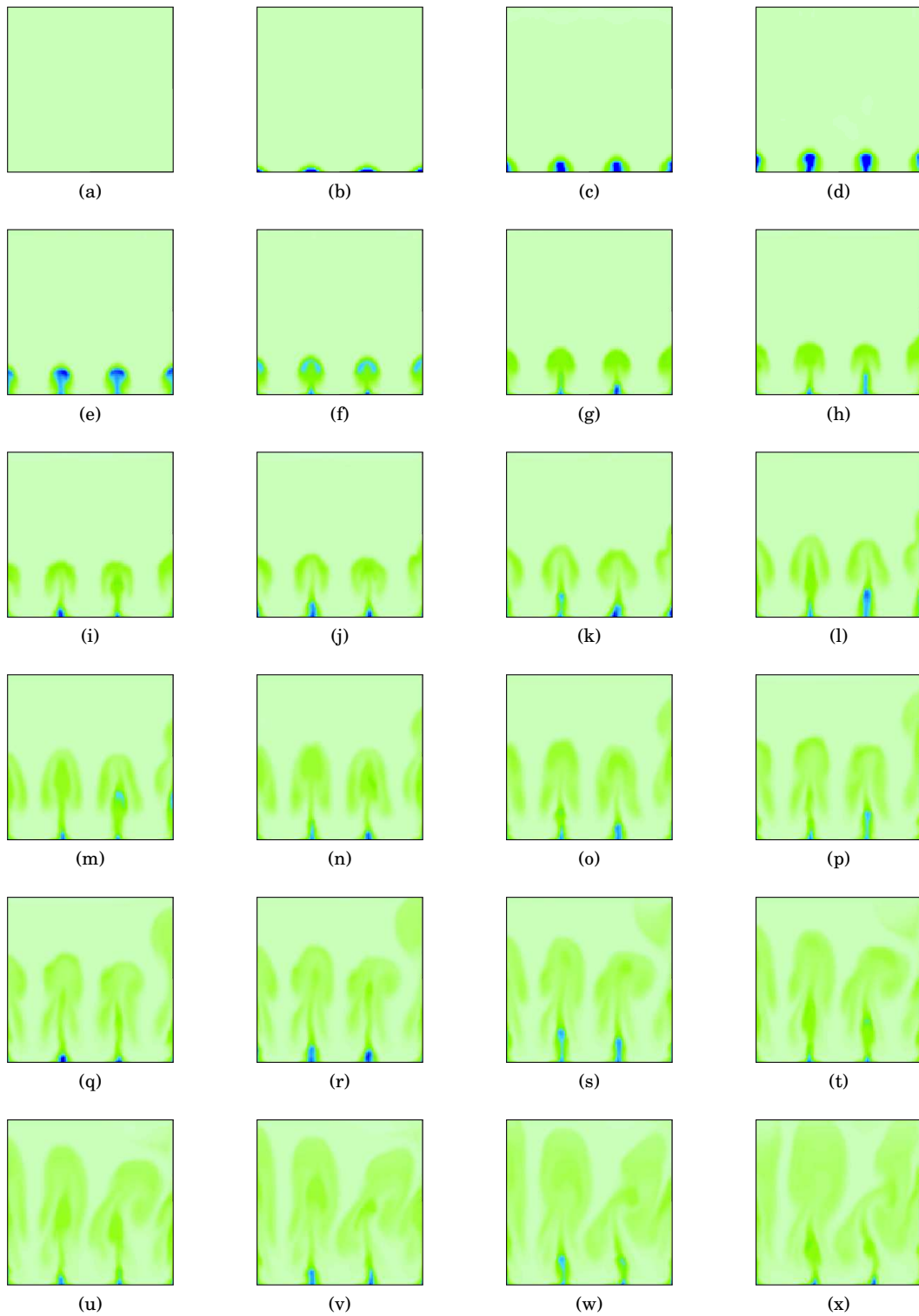


FIG. 10.53.: Évolution en temps du profil de la température T pour le cas test 10.2.6.

10.2.6.a. Influence de la tension de surface

On considère le même cas test de la section 10.2.6, mais cette fois-ci *on ne prend pas en compte la tension de surface*.

Résultats et discussion

Les résultats de cette simulation sont illustrés aux figures 10.54, 10.55, 10.56, 10.57 et 10.58 qui représentent respectivement l'évolution spatio-temporelle de la fraction de volume z , de la fraction de masse y , de la densité ρ , de la pression P et de la température T dans l'intervalle de temps $t = 0$ s, $t = 0.6$ s.

On observe que les bulles de vapeur se désagrègent beaucoup plus vite si on ne considère pas la tension de surface. Notamment, on voit sur la densité et sur la température la création d'une sorte de colonne de vapeur.

De plus, sur la figure 10.57 à la page 343 on remarque un meilleur comportement vis-à-vis de la condition limite sur la paroi nord. En effet, la prise en compte de la tension de surface génère des ondes «parasites» dans la partie haut du domaine car il y a une production de mélange même si elle est faible due à une condition limite imparfaite.

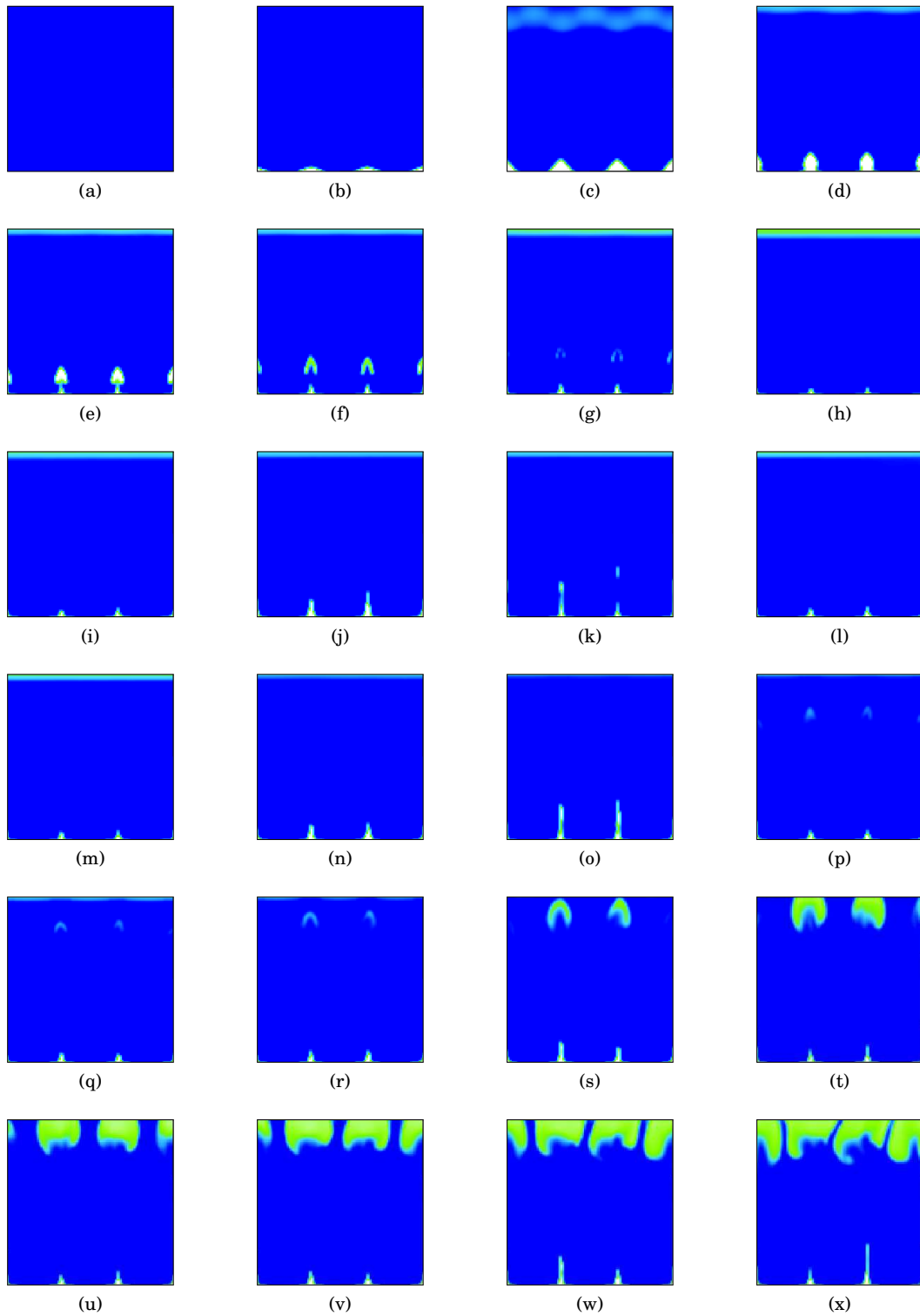


FIG. 10.54.: Évolution en temps du profil de la fraction volumique z pour le cas test 10.2.6.a.

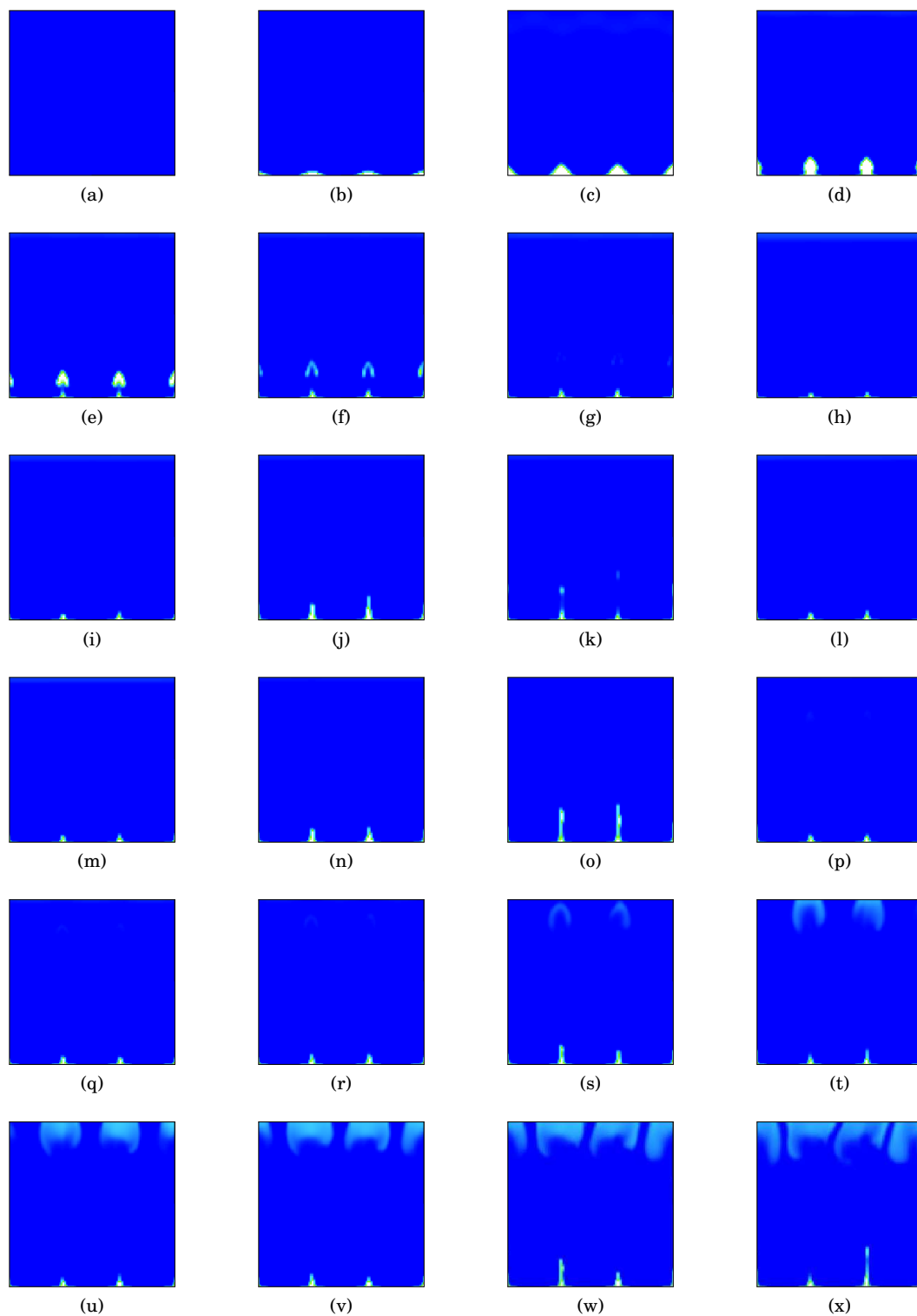


FIG. 10.55.: Évolution en temps du profil de la fraction de masse y pour le cas test 10.2.6.a

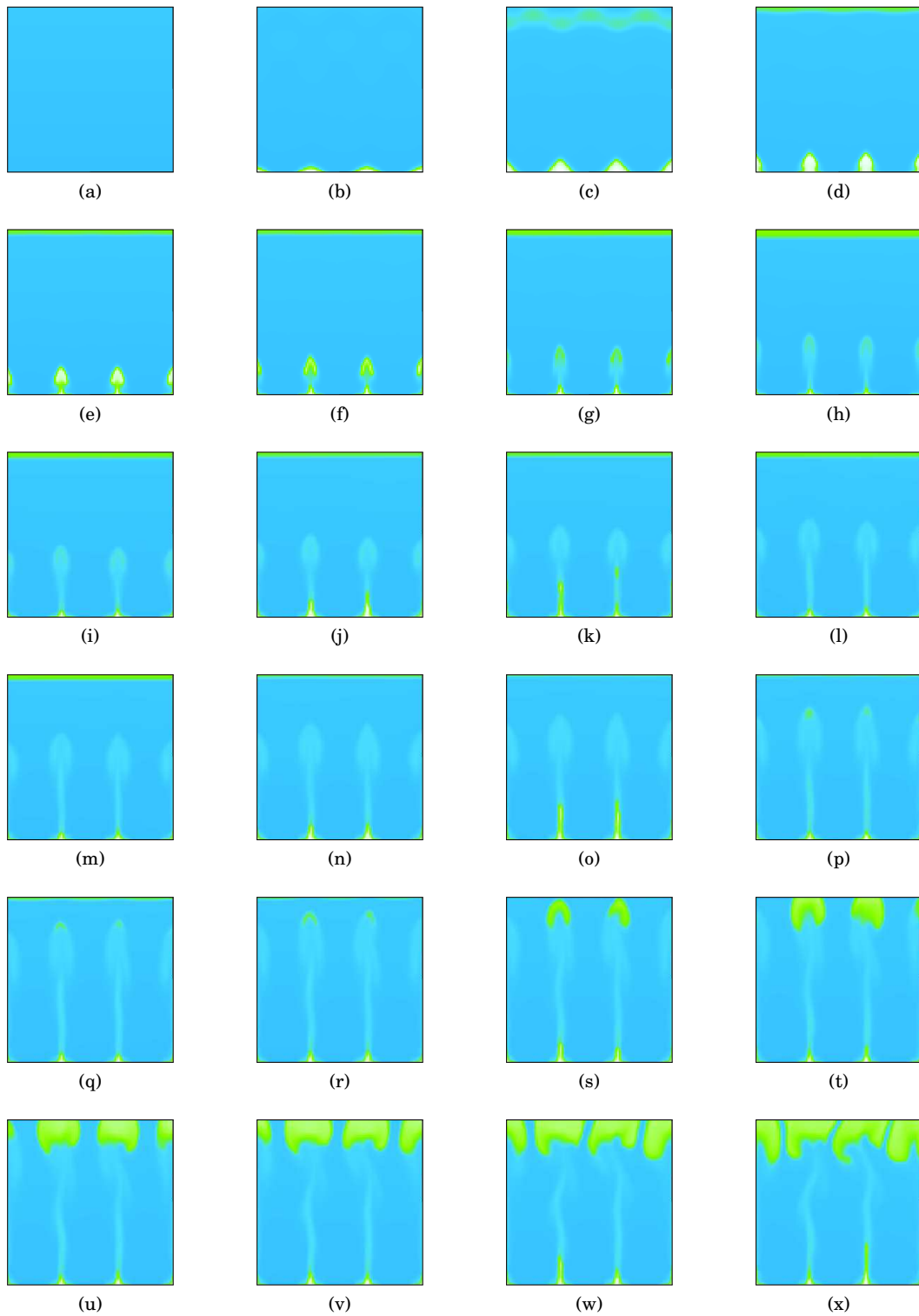


FIG. 10.56.: Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test 10.2.6.a

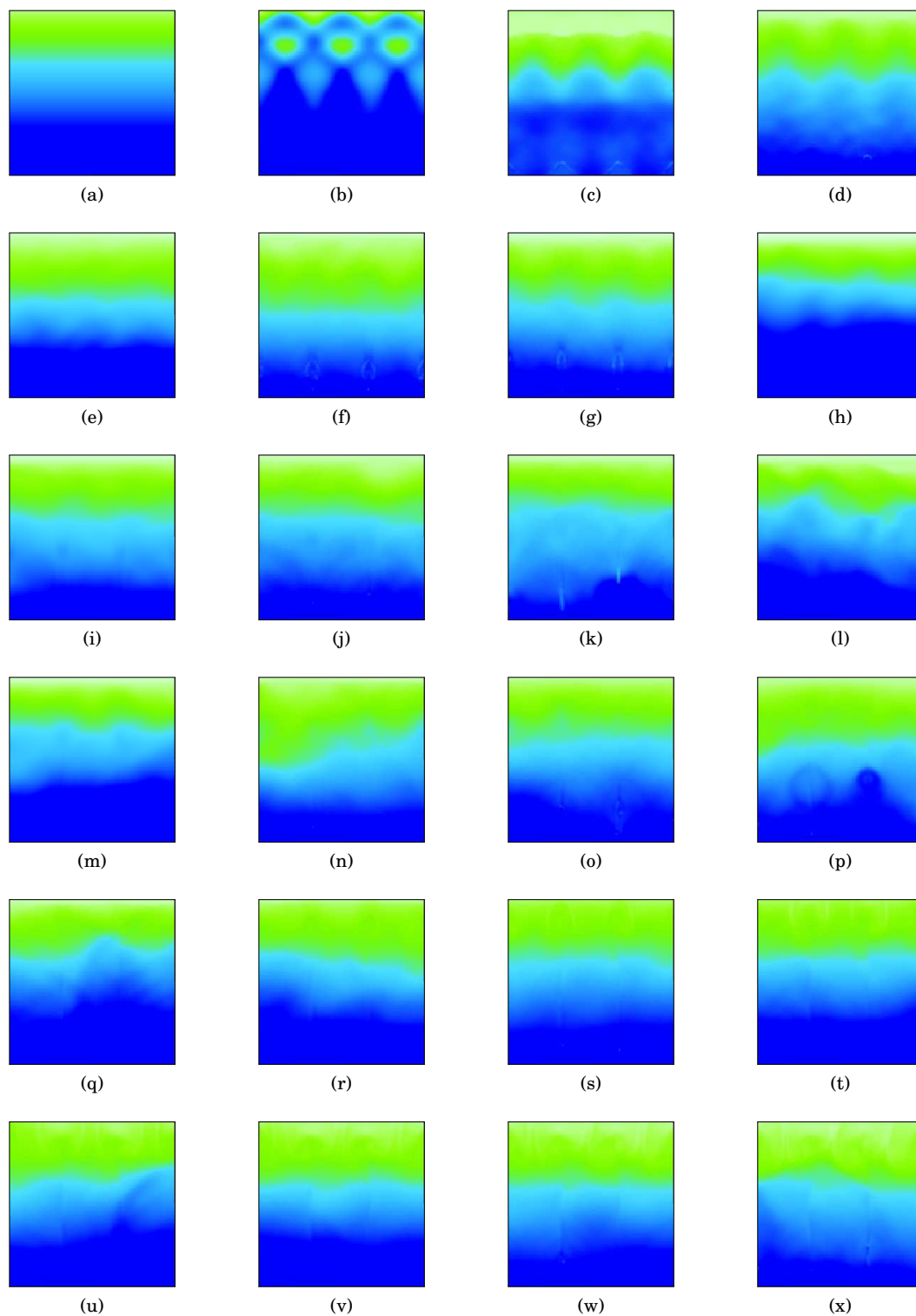


FIG. 10.57.: Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test 10.2.6.a

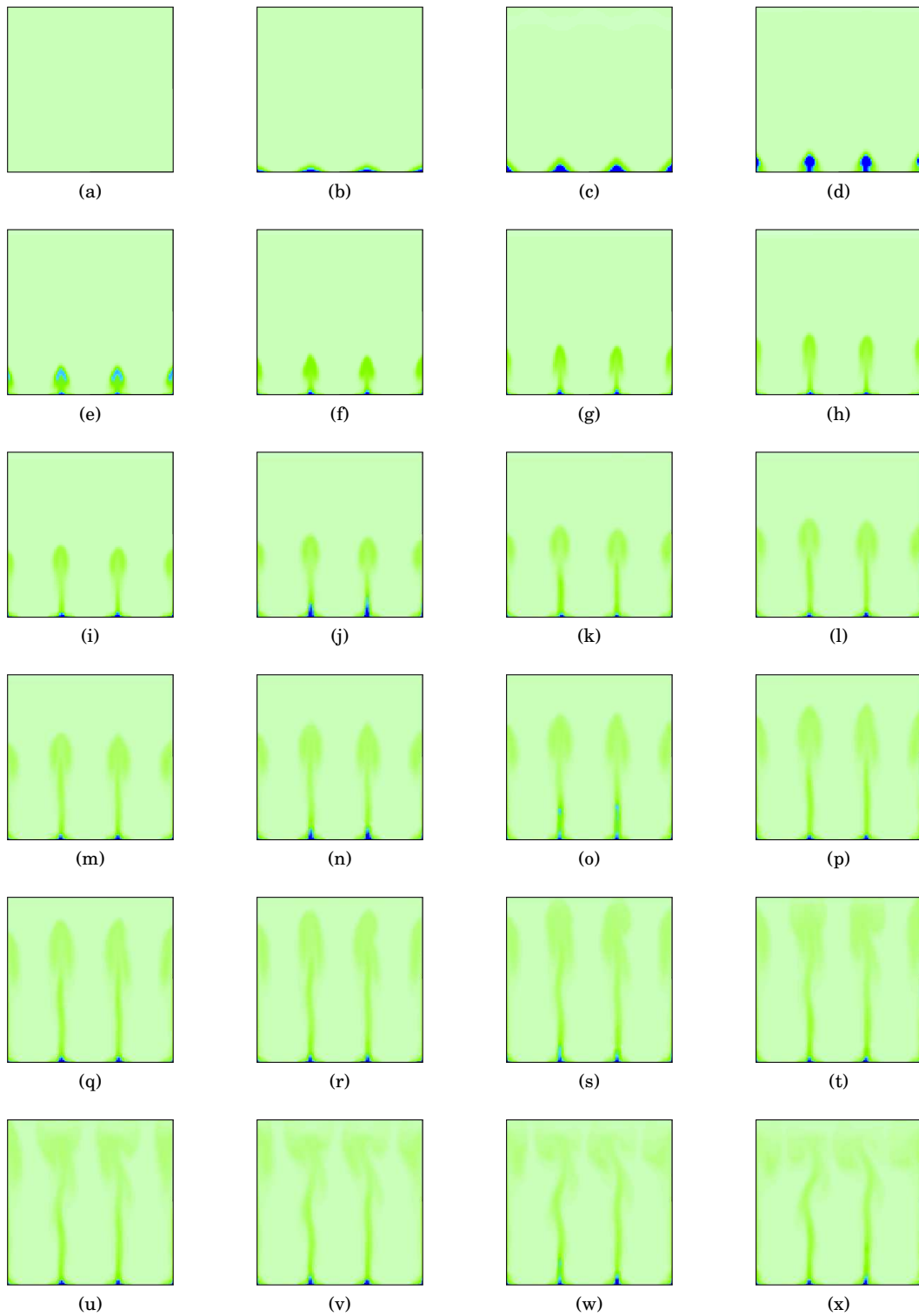


FIG. 10.58.: Évolution en temps du profil de la température T pour le cas test 10.2.6.a

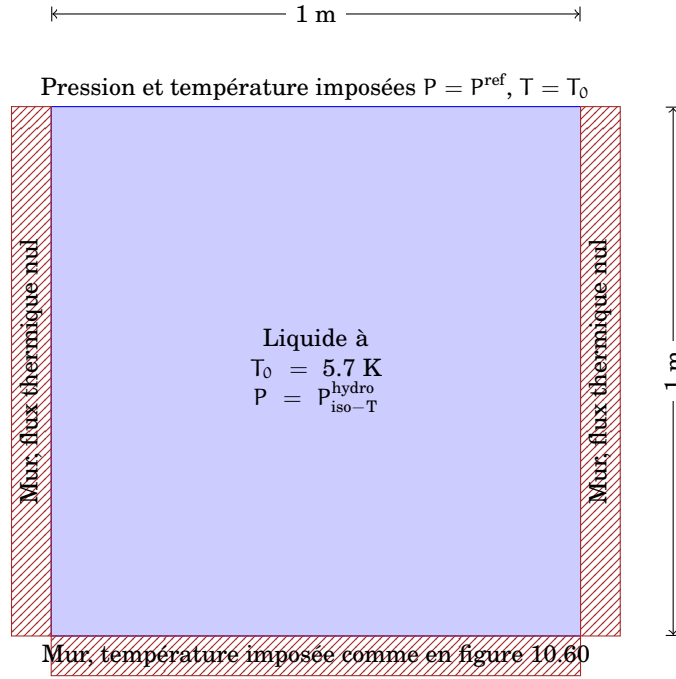


FIG. 10.59.: Géométrie du cas test 10.2.7

10.2.7. Création d'un film de vapeur

On veut maintenant simuler numériquement un problème d'ébullition en paroi avec le début de formation d'un film de vapeur.

Le système étudié est représenté à la figure 10.59 : un domaine carré de 1 m de coté discrétisé sur une grille de 200×200 mailles régulières carrées est initialement rempli d'un fluide à l'état liquide.

Les propriétés physiques du fluide sont décrites par une loi de type *stiffened gas* simplifiée dont les paramètres ont été donnés au tableau 6.2 et la loi de changement de phase est celle établie au chapitre 6. Les conductivités thermiques sont respectivement de $\vartheta_{\text{liq}} = 67.8 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}$ et $\vartheta_{\text{vap}} = 4.24 \text{ W/(m} \cdot \text{K)}$ et la tension de surface est de 7 N/m .

La température initiale est fixée à $T_0 = 5.7 \text{ K}$ et le fluide est initialement au repos ($\mathbf{u}_0 = \mathbf{0}$) dans tout le domaine. À l'instant $t = 0 \text{ s}$ le liquide n'est pas à saturation car on prend en compte la pression hydrostatique isotherme, donc la densité vaut $\rho_{\text{liq}} > \rho_{\text{liq}}^{\text{sat}}(T_0) \approx 58.7057826446336 \text{ kg/m}^3$ et la pression dans le haut de domaine est égale à $P^{\text{ref}} = 8 \times 10^3 \text{ Pa} > P^{\text{sat}}(T_0) \approx 7.333 \times 10^3 \text{ Pa}$ (pour les détails sur l'initialisation à la pression hydrostatique isotherme voir le paragraphe 10.2.5 à la page 323).

Du point de vue de la *dynamique*, les parois latérales et inférieure ont des conditions aux limites de type mur tandis que sur la paroi supérieure on impose une pression fixée à la pression de référence supérieure à la pression de saturation initiale, à savoir $P = P^{\text{ref}} > P^{\text{sat}}(T_0) \approx 7.333 \times 10^3 \text{ Pa}$ et une température fixée à la température initiale $T_0 = 5.7 \text{ K}$. Le flux de masse est donc nul sur tous les bords du domaine.

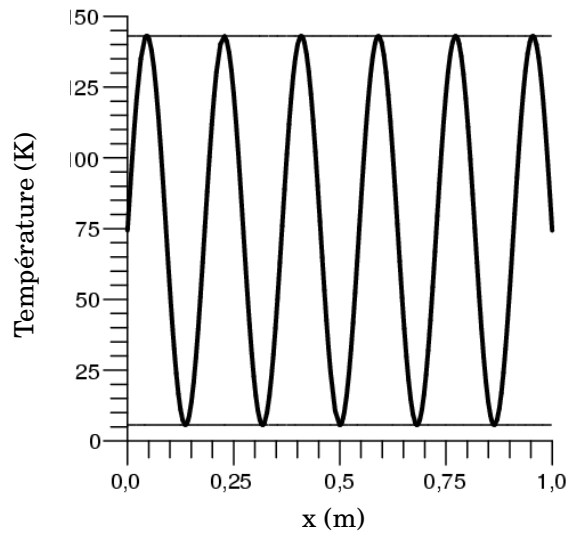


FIG. 10.60.: Profil de la température $T(x, y)$ imposée au niveau de la paroi $y = 0$ pour le cas test 10.2.7

Pour créer un changement de phase, la paroi inférieure est chauffée par une température imposée et on considère une gravité de $\bar{g} = 100 \text{ m/s}^2$. Donc, du point de vue de la *thermique*, les conditions aux limites sont les suivantes : un flux nul sur les parois latérales et supérieure et une température imposée sur la paroi inférieure selon la loi

$$T(x, y = 0) \stackrel{\text{def}}{=} T_i + (T_s - T_i)(\sin(11\pi x) + 1),$$

avec $T_i = 10 \text{ K}$ et $T_s = 143 \text{ K}$ (voir figure 10.60).

On utilise le *schéma au deuxième ordre en espace et en temps* auquel on a ajouté la gravité, la tension de surface ainsi que la diffusion de la chaleur.

Résultats et discussion

Les résultats de cette simulation sont illustrés aux figures 10.61, 10.62, 10.63, 10.64 et 10.65 qui représentent respectivement l'évolution spatio-temporelle de la fraction de volume z , de la fraction de masse y , de la densité ρ , de la pression P et du champ de température T dans l'intervalle de temps $t = 0 \text{ s}$, $t = 0.5 \text{ s}$.

Comme dans le cas précédent, grâce au profil sinusoïdal de la température imposée au niveau de la paroi sud, on observe la nucléation de plusieurs bulles de vapeur au niveau des maxima de la température. Elles grossissent sous l'effet du changement de phase et, sous l'effet de la gravité, elles se détachent et montent vers le haut du domaine. La température de ces bulles étant supérieure à celle du liquide les entourant (voir figure 10.65 à la page 352), elles vont non seulement se refroidir et par conséquent liquéfier mais aussi réchauffer le liquide environnant. Ce réchauffement, combiné avec la source de chaleur imposé au niveau de la paroi inférieure, va ensuite créer des instabilités hydrodynamiques entre la phase vapeur en mouvement et la phase liquide

immobile qui permettent la coalescence des bulles au contact de la paroi.

Encore une fois, la condition limite sur le bord supérieur ne permet pas aux bulles de sortir : la vapeur s'accumule dans la partie haute du domaine et le liquide continue à se réchauffer jusqu'à sa vaporisation complète.

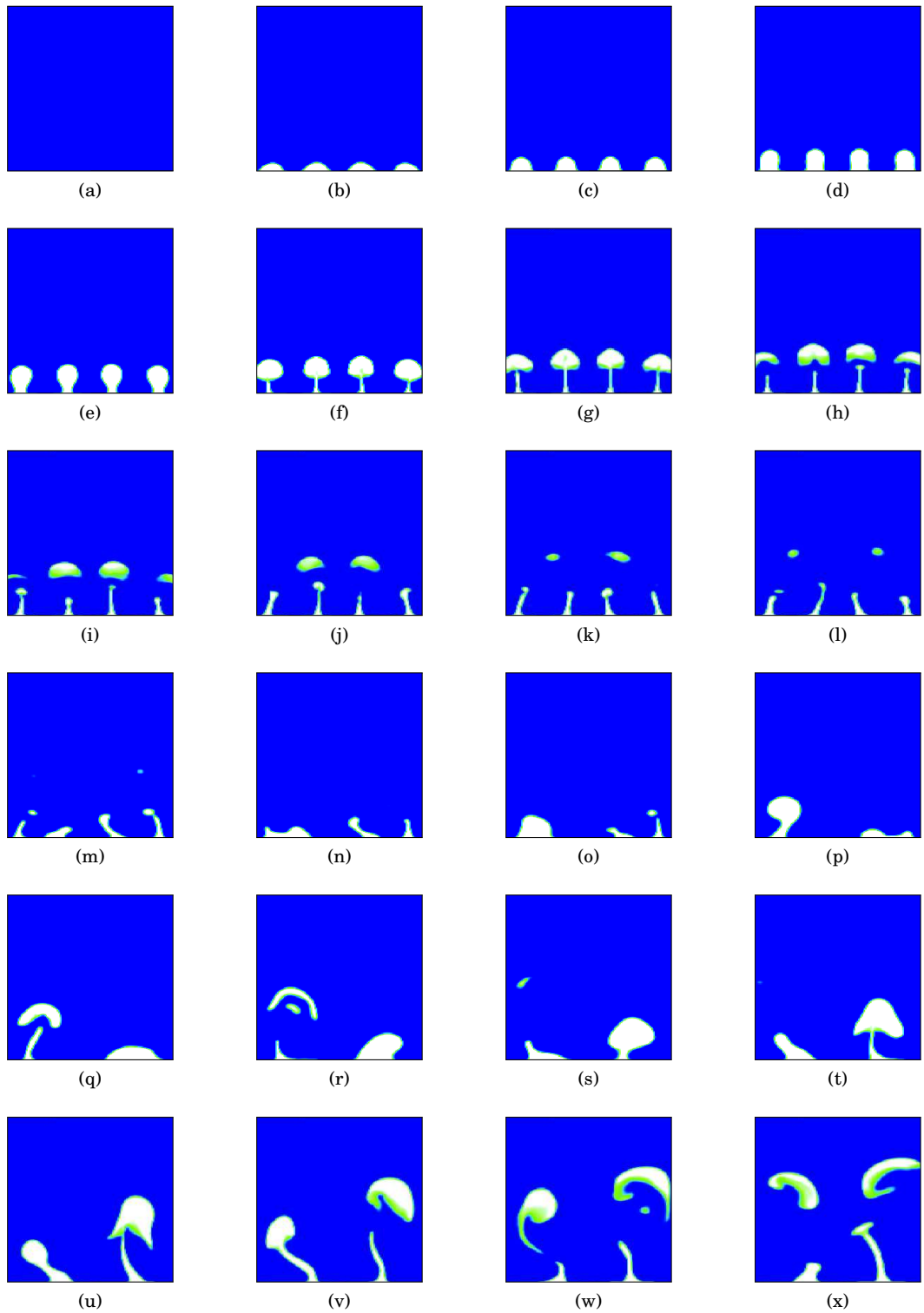


FIG. 10.61.: Évolution en temps du profil de la fraction volumique z pour le cas test 10.2.7

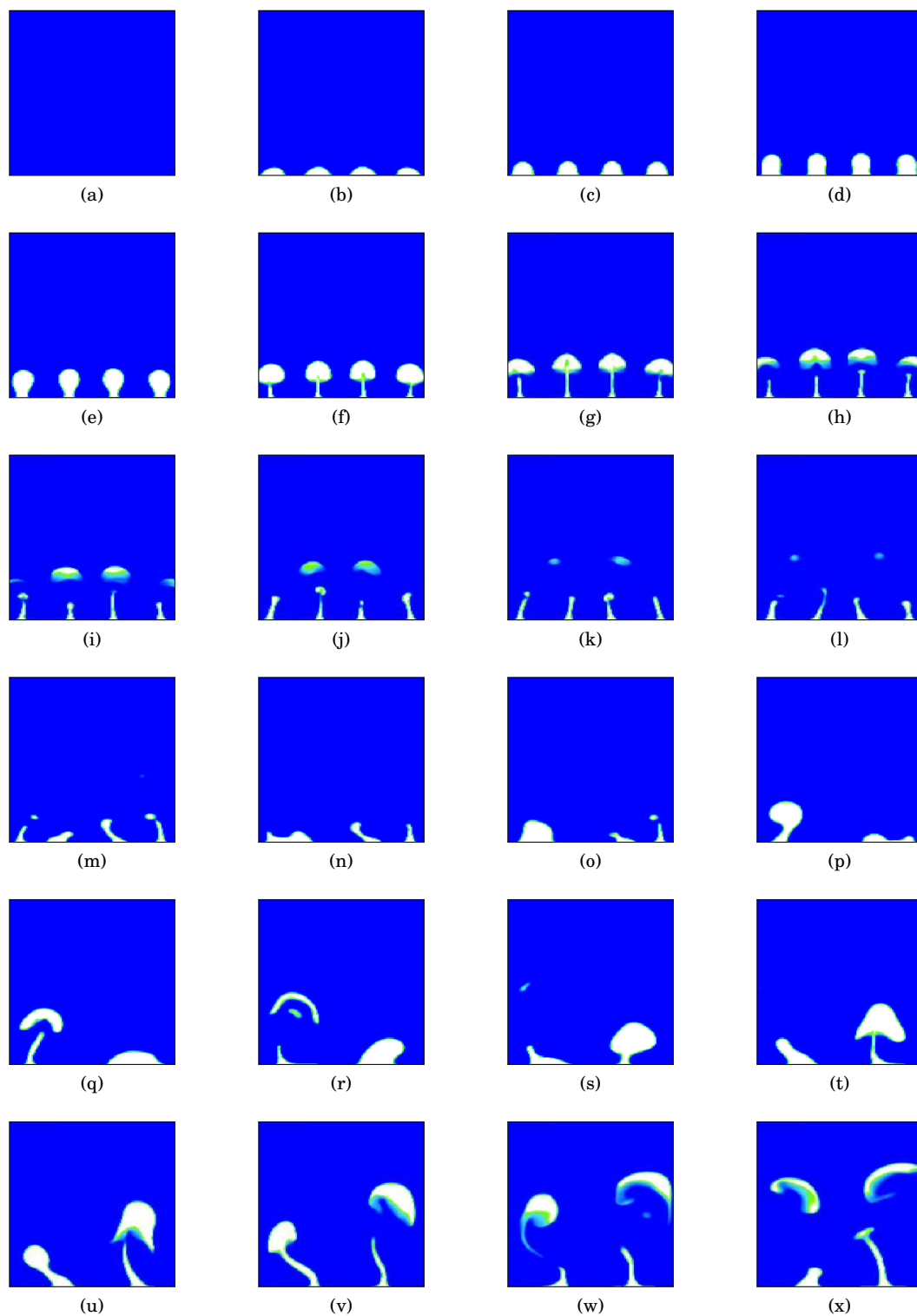


FIG. 10.62.: Évolution en temps du profil de la fraction de masse y pour le cas test 10.2.7

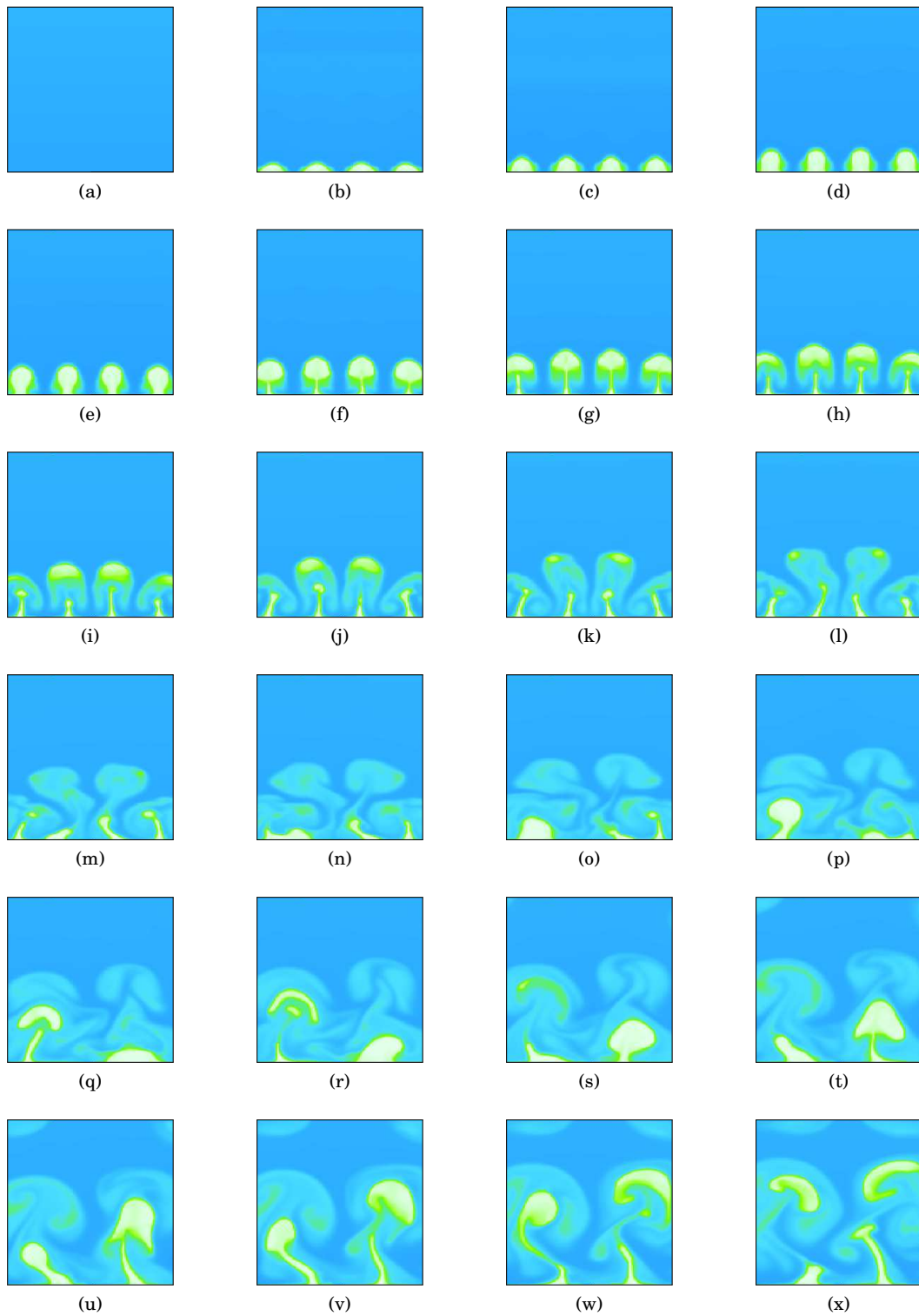


FIG. 10.63.: Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test 10.2.7

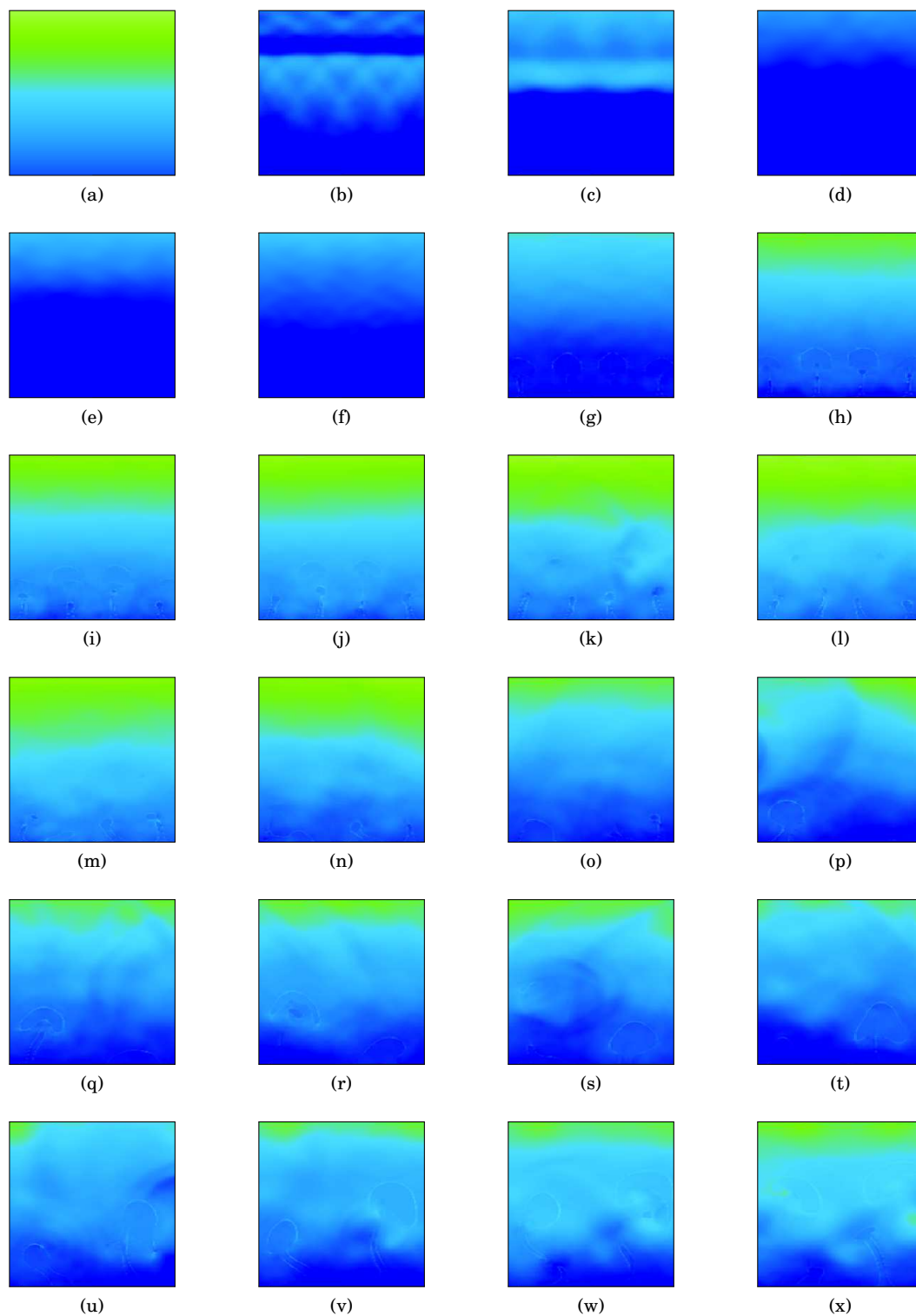


FIG. 10.64.: Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test 10.2.7



FIG. 10.65.: Évolution en temps du profil de la température T pour le cas test 10.2.7

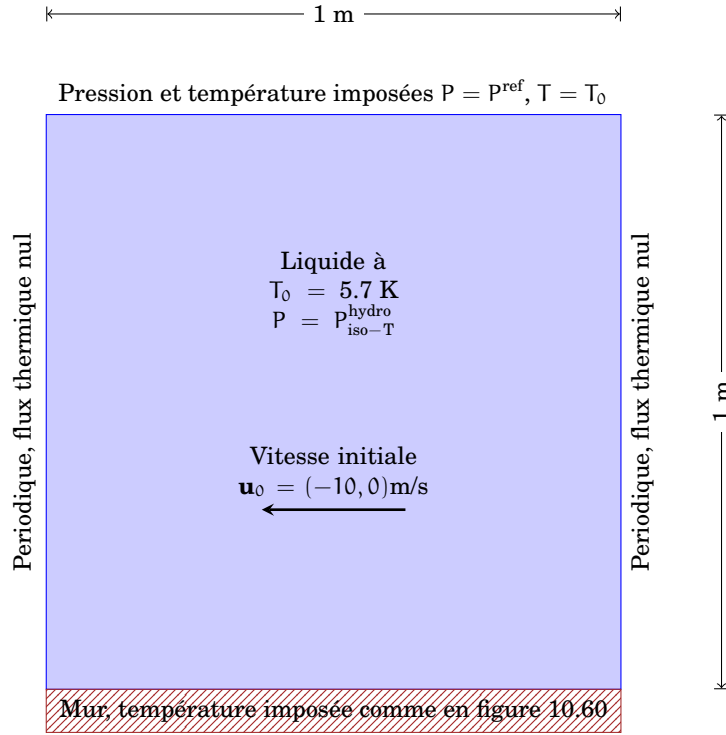


FIG. 10.66.: Géométrie du cas test 10.2.7.a

10.2.7.a. Influence de la vitesse horizontale

On modifie légèrement le cas test de la section 10.2.7 : on considère une vitesse initiale horizontale non nulle $\mathbf{u}_0 = (-10, 0) \text{ m/s}$ et des conditions limites périodiques sur les parois est et ouest.

Résultats et discussion

Les résultats de cette simulation sont illustrés aux figures 10.67, 10.68, 10.69, 10.70 et 10.71 qui représentent respectivement l'évolution spatio-temporelle de la fraction de volume z , de la fraction de masse y , de la densité ρ , de la pression P et du champ de température T dans l'intervalle de temps $t = 0 \text{ s}$, $t = 0.6 \text{ s}$.

On observe la formation soudaine du film de vapeur au contact de la paroi chauffée.

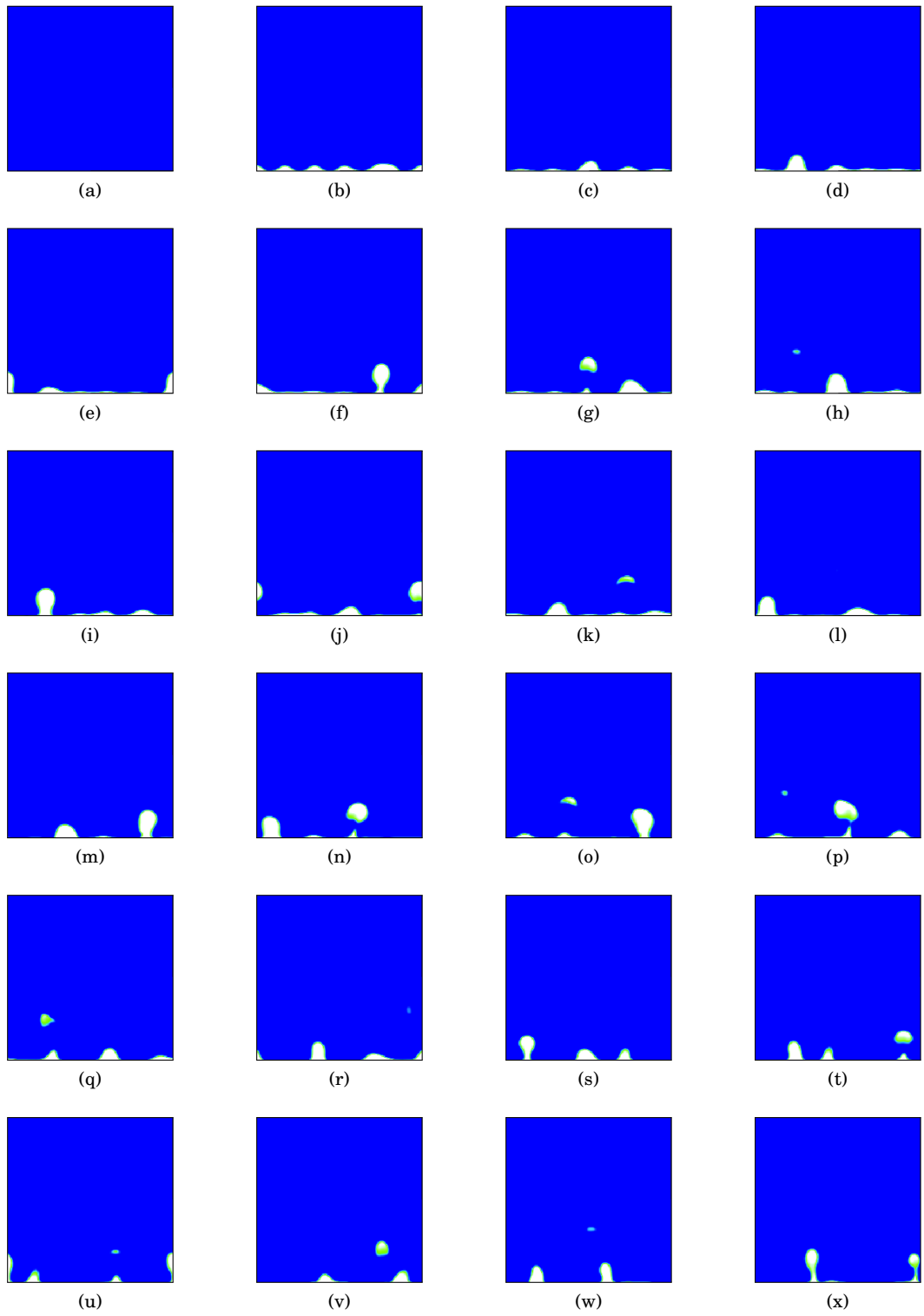


FIG. 10.67.: Évolution en temps du profil de la fraction volumique z pour le cas test 10.2.7.a

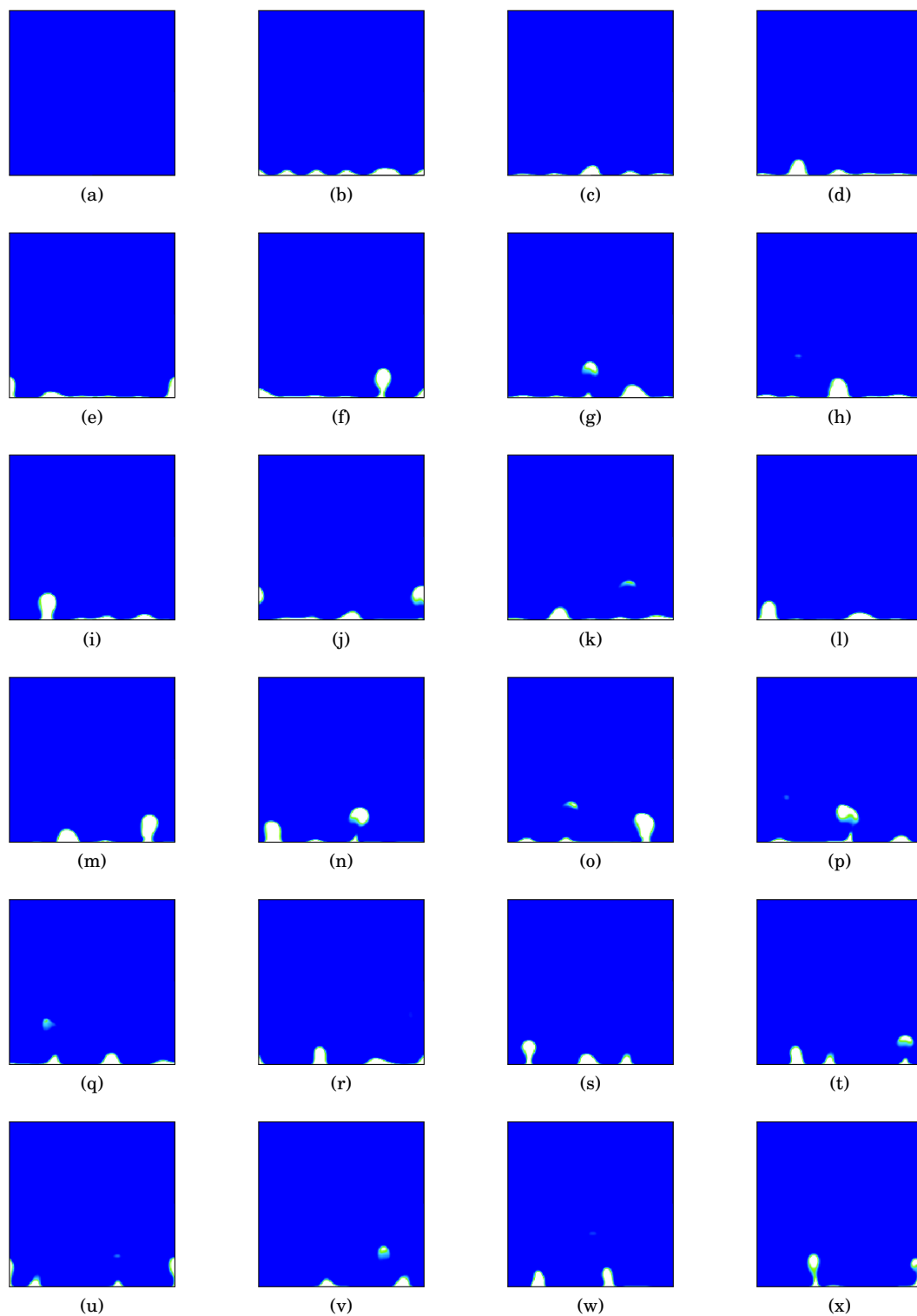


FIG. 10.68.: Évolution en temps du profil de la fraction de masse y pour le cas test 10.2.7.a

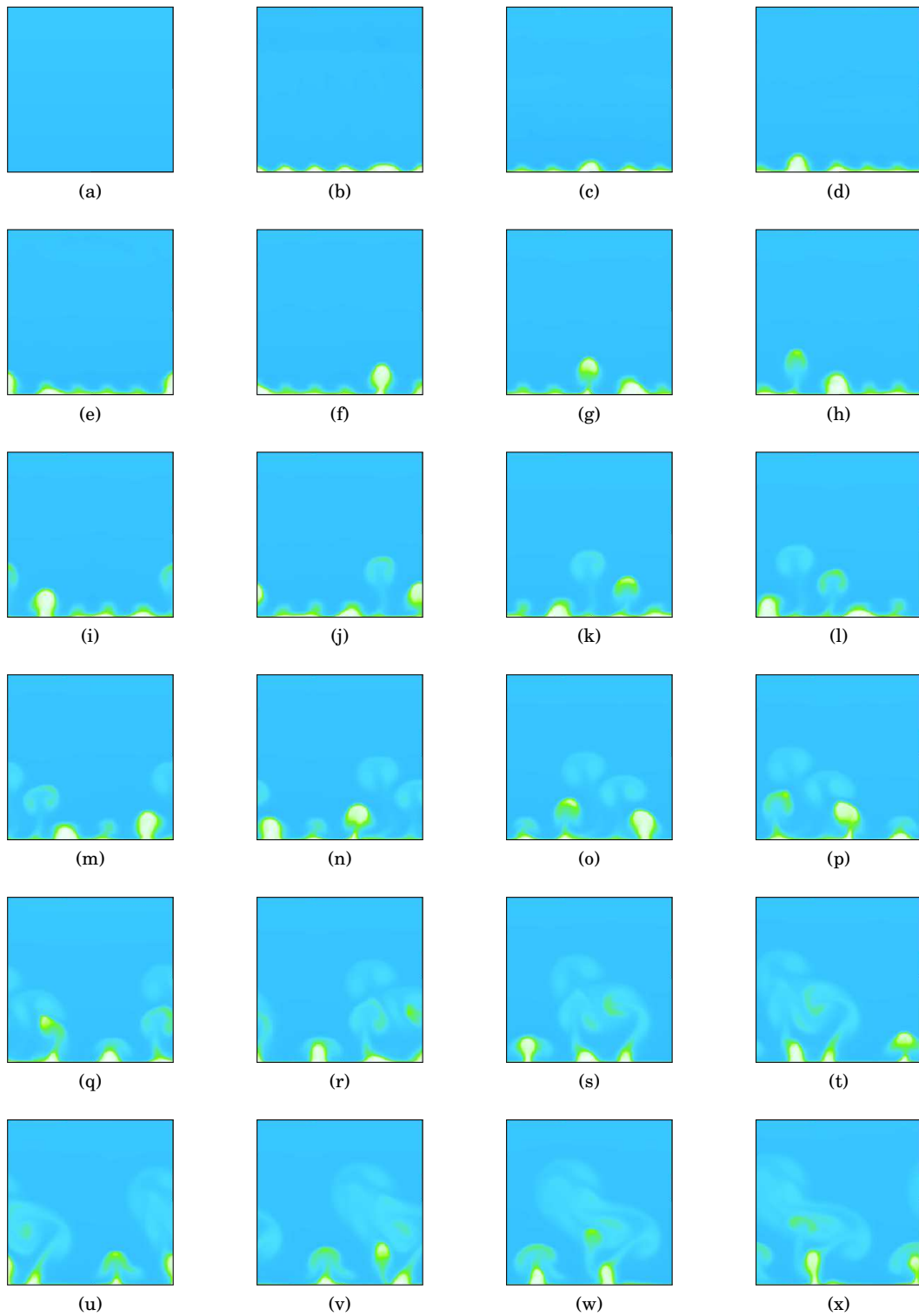


FIG. 10.69.: Évolution en temps du profil de la densité ρ pour le cas test 10.2.7.a

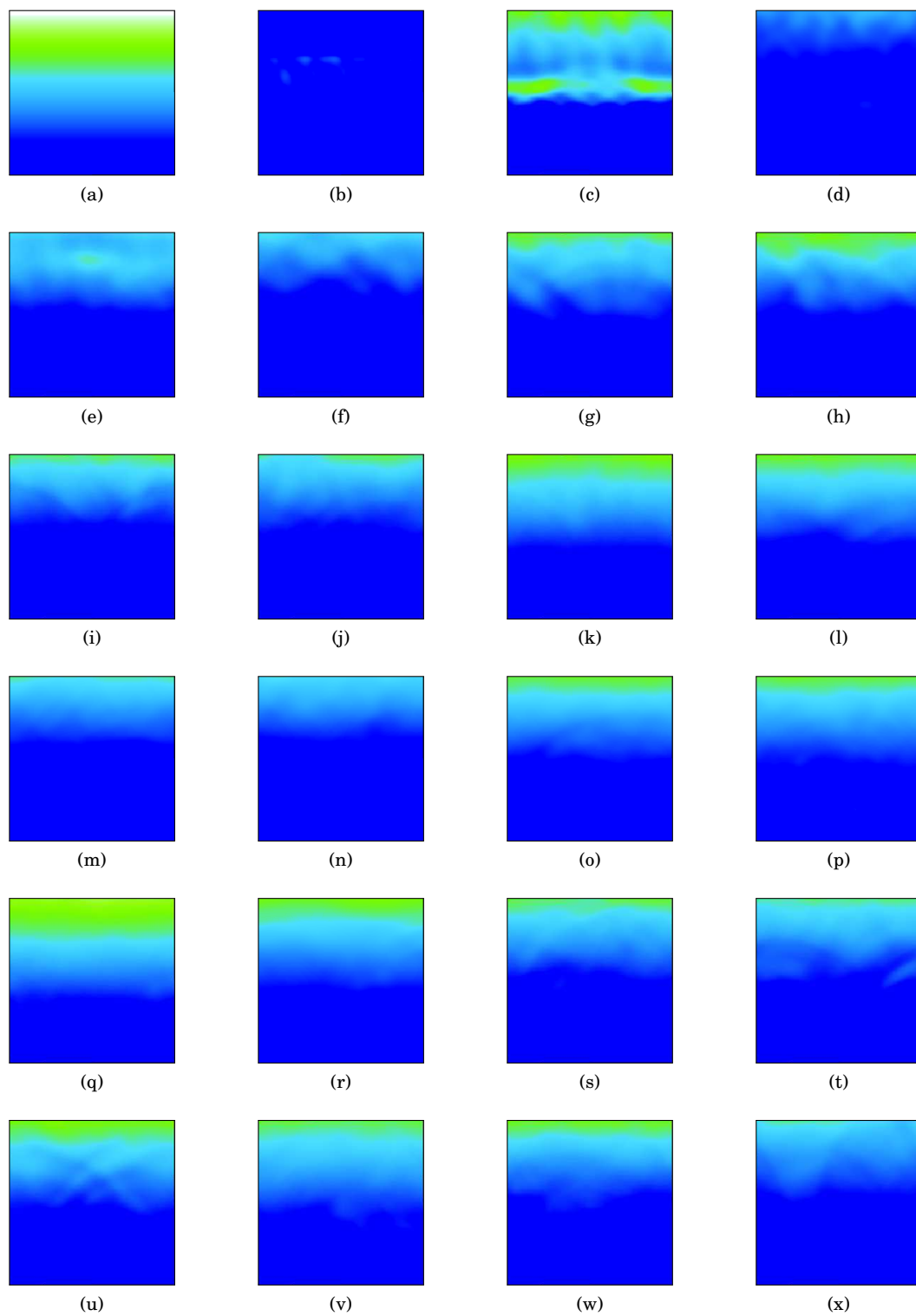


FIG. 10.70.: Évolution en temps du profil de la pression P pour le cas test 10.2.7.a

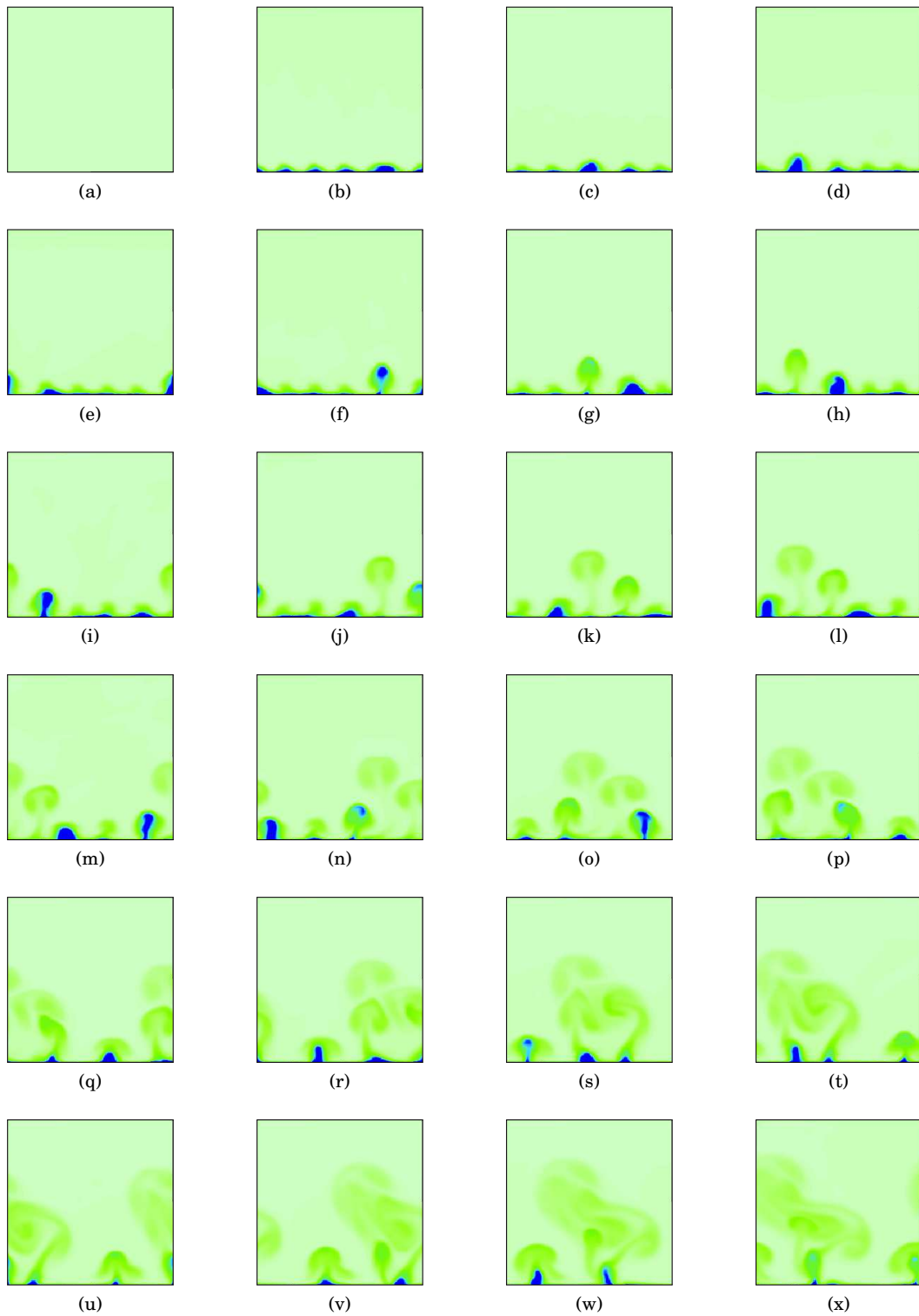


FIG. 10.71.: Évolution en temps du profil de la température T pour le cas test 10.2.7.a

10.3. Conclusion

Les résultats numériques montrés dans ce chapitre sont importants car ils montrent que le modèle basé sur des interfaces diffuses et la méthode de relaxation qui lui est associée permettent, au moins du point de vue qualitatif, de simuler de manière satisfaisante des problèmes de changement de phase anisothermes. Ces simulations permettent d'affirmer que, malgré le caractère presque incompressible du liquide, le grand écart des densités et le calcul approché du changement de phase (basé sur une approximation au sens des moindres carrées), on peut effectuer des résolutions numériques stables et ceci malgré quelques oscillations en pression.

Une des questions fondamentales que nous nous sommes posées était aussi de savoir si une telle modélisation du changement de phase influence la dynamique de l'écoulement. En particulier, du fait que dans l'interface on a un ralentissement des ondes de pression, nous nous sommes demandés si le changement de phase épaissit encore davantage cette interface. Les simulations effectuées apportent une première réponse, à savoir que, avec le système de relaxation résolu en deux étapes, le changement de phase semble engendrer un très faible épaississement de l'interface par rapport à celui généré par l'étape de transport. Il serait donc intéressant de tester des schémas qui ne diffusent pas lors de l'étape de transport, l'épaisseur de l'interface étant ainsi due seulement au changement de phase. Parmi ces schémas citons notamment le schéma anti-diffusif de Després et Lagoutière [31] adapté au cas du système à cinq équations avec fermeture isobare par Kokh et Lagoutière [61].

De plus, il serait intéressant de confronter la vitesse d'avancement du front de changement de phase avec des expériences physiques. Pour cela il serait préférable de passer à des lois d'état tabulées à la place des lois de type *stiffened gas*. En ce qui concerne le schéma numérique, l'étape de projection ayant déjà été résolue au chapitre 7, il reste à calculer une extension de ces lois à l'intérieur du dôme de saturation pour l'étape de transport.¹ Il serait aussi opportun de confronter les résultats obtenus avec le schéma de «transport-projection» basé sur le système HRM à cinq équations isotherme avec d'autres systèmes HRM, ou bien d'utiliser le même système HRM mais avec d'autres schémas numériques. Il serait également envisageable de renoncer aux schémas de type «transport-projection» et d'utiliser des schémas qui ne distinguent pas l'étape de transport de l'étape de projection, comme par exemple le schéma de Dumbser *et al.* [32].

Il reste aussi à prouver, au moins numériquement, que l'approche de relaxation capture la solution de Liu du système d'Euler de changement de phase. Pour cela il faudrait comparer les solutions obtenues par le solveur de Riemann exact de Voß [96] appliqué au système de changement de phase avec les solutions obtenues par notre approche de relaxation. La difficulté principale de ces confrontations réside dans le

¹Car les données expérimentales sont bien évidemment disponibles seulement à l'extérieur du dôme de saturation

fait que Voß [96] utilise une loi d'état de type Van der Waals avec correction de Maxwell et, pour utiliser cette loi dans notre schéma, il faudrait pouvoir modifier la loi de Van der Waals à l'intérieur du dôme de saturation, de façon à ce que le système à cinq équations reste hyperbolique.

Remarquons aussi que les simulations effectuées par Jaouen [58] avec les lois d'état de type gaz parfait simplifié (c'est-à-dire avec $c_{v_1} = c_{v_2}$) laissent penser que le choix du schéma numérique est délicat car on risque de capturer des solutions entropiques qui ne sont pas des solutions de Liu. C'est pour cela que Jaouen [58] a utilisé un solveur avec viscosité évanescence et c'est là une des raisons qui nous ont incité à adopter une approche de type «relaxation». Cependant, les simulations de Voß [96], réalisées avec la loi de Van der Waals avec correction de Maxwell, semblent corroborer l'hypothèse que n'importe quelle méthode numérique capture la solution de Liu grâce à la viscosité numérique présente dans toutes ces méthodes. On a donc essayé de donner une possible explication au comportement mis en évidence par Jaouen [58] et il nous semble qu'en effet les situations pathologiques qu'il rencontre sont liées à la loi d'état choisie. L'hypothèse $c_{v_1} = c_{v_2}$ implique la continuité des énergies à saturation : ce n'est pas un changement de phase du premier ordre. En fait, l'équation de conservation de l'énergie n'intervient pas pour les états de mélange à l'équilibre. De plus, pour ces états le système d'Euler se réduit au p-système qui est seulement faiblement hyperbolique (voir par exemple Caro *et al.* [24]).

CHAPITRE 11

Conclusion générale et perspectives

La simulation du changement de phase liquide-vapeur concerne de nombreux domaines. Notamment celui de la conception et de la sûreté des réacteurs nucléaires, dans lequel la *crise d'ébullition* sur une paroi chauffante, qui marque le passage d'un régime d'ébullition nucléée à un régime d'ébullition en film, est un phénomène physique local mais aux conséquences macroscopiques importantes : ce passage entraîne la formation d'un film de vapeur autour des crayons de combustible qui se trouvent ainsi isolés de l'eau de refroidissement. On a alors une brutale augmentation de la température des crayons conduisant ainsi à leur destruction presque instantanée et donc à la fusion du cœur du réacteur.

Dans l'optique de simuler la dynamique de la crise d'ébullition, dans cette thèse nous avons développé et analysé un modèle «fin» décrivant l'évolution d'un fluide pouvant changer de phase et nous avons réalisé quelques simulations numériques.

* *
*

L'une des principales difficultés rencontrées en simulation numérique directe des écoulements diphasiques en général, et des écoulements liquide-vapeur avec changement de phase en particulier, est la description du mouvement des interfaces. Dans ce travail nous avons adopté une approche de type «interface diffuse» qui consiste à ne pas modéliser les interfaces liquide-vapeur comme des surfaces de discontinuité mais comme des zones volumiques à travers lesquelles les grandeurs physiques du fluide varient fortement mais continûment.

La première étape de la modélisation a consisté à modéliser physiquement le comportement du fluide situé à l'intérieur de cette zone interfaciale. Cette construction a été réalisée au chapitre 2 en se basant sur la thermodynamique classique. Celle-ci permet en effet de définir une loi d'état de changement de phase pour le fluide dans son intégralité (phases pures et interfaces) en résolvant un problème d'optimisation portant sur une entropie de mélange. Une étude mathématique des propriétés de cette loi d'état nous a permis de montrer l'équivalence avec une construction basée sur l'inf-convolution de deux entropies étudiée dans Helluy [46], Helluy et Seguin [48] ainsi qu'avec la construction classique d'une enveloppe concave.

Disposant de cette modélisation, au chapitre 3 nous avons pu établir le système d'équations aux dérivées partielles régissant le mouvement du fluide dans sa totalité. Il s'agit du système des équations d'Euler fermé par cette loi de changement de phase obtenue comme solution d'un problème d'optimisation. Nous avons ainsi un unique système d'équations aux dérivées partielles qui régit le mouvement des phases liquide et vapeur ainsi que l'ensemble des «interfaces» du fluide considéré. D'un point de vue numérique cela aura un avantage majeur : en résolvant un seul système d'équations on n'aura plus à se préoccuper du mouvement des interfaces car leur évolution fera partie de la solution de ce seul système.

Il est bien connu que la loi de changement de phase ainsi construite est en partie dégénérée au sens où elle est caractérisée par une entropie concave mais pas strictement concave. Ceci peut poser des problèmes car la stricte concavité de l'entropie physique du fluide est la condition suffisante usuelle qui assure que le système d'Euler est hyperbolique (cette dernière propriété étant nécessaire pour la résolution théorique et numérique des équations). Dans notre cas, bien que les vitesses caractéristiques (valeurs propres de la matrice jacobienne) soient réelles, il n'était pas évident que la vitesse du son était non nulle, ce qui implique l'existence d'une base de vecteurs propres réels et donc l'hyperbolicité du système. Au chapitre 3 nous avons démontré que, sous des hypothèses très générales vérifiées par la plupart des lois d'état monophasiques, le système d'Euler diphasique avec changement de phase est effectivement strictement hyperbolique. Cependant la vitesse du son est discontinue.

Ensuite, au chapitre 4 nous avons rappelé quelques points clés à propos de l'existence et de l'unicité des solutions du problème de Riemann. Il est bien connu que si les états initiaux appartiennent à deux phases distinctes alors il existe plusieurs solutions entropiques à cause de la perte de convexité des courbes isentropes (conséquence de la discontinuité de la vitesse du son). Il est néanmoins possible de résoudre le problème de Riemann de manière unique grâce au critère entropique de Liu.

Soulignons que nous avons seulement effleuré le sujet en indiquant les ingrédients essentiels du problème mais nous ne sommes absolument pas rentrés dans les détails. Ce type de «pathologie» ouvre en effet de nombreuses questions mathématiques et a constitué le sujet de plusieurs recherches. Pour plus de précisions nous renvoyons

notamment aux ouvrages de Fan [36], Heuzé [50], Jaouen [58], LeFloch [68], Menikoff et Plohr [80], Müller et Voß [81], Voß [96].

* *
*

Une fois le cadre mathématique bien établi, il aurait été intéressant d'écrire un solveur de Riemann exact pour le système des équations d'Euler fermé par la loi de changement de phase, suivant les lignes de la thèse de Voß [96] pour une loi de type Van der Waals. Même si ceci fournissait une solution de référence, toutefois il n'aurait pas permis d'écrire un code de calcul exploitable industriellement. De plus, toujours à cause de la discontinuité de la vitesse du son, sa résolution numérique avec des méthodes d'approximation classiques (comme les schémas de Lax-Friedrich ou de Roe ou les schémas ENO, HLLC, HLLE etc., voir par exemple Toro [93] pour une description) est plutôt compliquée en pratique (voir notamment la thèse de Voß [96] qui les a comparés pour une loi de Van der Waals avec correction de Maxwell). C'est pourquoi nous avons préféré adopter une approche de type «relaxation».

Au chapitre 8, nous avons donc construit un système à six équations aux dérivées partielles par minimisation de l'action hamiltonienne sous la contrainte de la conservation de la masse et de l'entropie. L'utilisation d'un tel principe ne rendant pas compte des effets dissipatifs, nous avons ensuite utilisé le second principe de la thermodynamique pour en déduire les termes sources portant sur les fractions de masse, de volume et d'énergie. Ces termes sources étant précisément les conditions d'optimalité pour la maximisation de l'entropie de mélange, nous avons alors montré que le système des équations d'Euler avec changement de phase peut être obtenu comme limite de relaxation de ce système augmenté à six équations contenant des termes sources de relaxation : lorsque les temps caractéristiques de la transition de phase tendent vers zéro, le système augmenté tend vers l'équilibre thermodynamique modélisant ainsi le phénomène du changement de phase.

On a ensuite observé que ce système n'est pas l'unique candidat possible comme sur-système. En effet, nous avons par la suite retenu et étudié un système à cinq équations avec fermeture isotherme qui correspond à une relaxation partielle en température du système augmenté à six équations.

La mise en œuvre numérique de cette approche, décrite au chapitre 9, a été réalisée par décomposition d'opérateurs. Chaque pas de temps est divisé en deux étapes : hydrodynamique sans termes de relaxation, puis relaxation des quantités thermodynamiques en maximisant l'entropie du mélange. Concrètement,

- ① dans une première étape on résout le modèle à cinq équations avec fermeture isotherme sans les termes sources de changement de phase, par une méthode de volumes finis où les flux numériques sont calculés à l'aide d'un solveur de Riemann approché de type Roe ;
- ② dans la deuxième étape on prend en compte les termes sources de changement de phase en projetant la solution sur la variété d'équilibre thermodynamique. Autre-

ment dit, connaissant les variables thermodynamiques phasiques, on maximise l'entropie de mélange et on obtient ainsi de nouvelles valeurs des concentrations phasiques.

À ce niveau plusieurs modifications sont à l'étude. Par exemple on aimerait résoudre le modèle homogène à cinq équations de l'étape ① avec un schéma numérique anti-diffusif en adaptant le schéma de Kokh et Lagoutière [61], qui a été écrit pour un système à cinq équations avec fermeture isobare, à notre système avec fermeture isotherme. Ceci devrait permettre de mesurer l'épaississement de l'interface dû seulement au changement de phase (alors que dans nos tests la diffusion de l'interface semble surtout due au schéma utilisé pour la partie «transport»).

Sinon, il serait aussi intéressant d'utiliser directement le modèle homogène à cinq équations avec fermeture isobare au lieu de celui avec fermeture isotherme : bien que la fermeture isobare ne correspond pas à une relaxation partielle du système augmenté à six équations, ce système peut néanmoins être vu simplement comme un solveur de la partie convective.

Il reste aussi à prouver, au moins numériquement, que l'approche de relaxation capture bien la solution de Liu du système d'Euler de changement de phase. Pour cela il faudrait comparer les solutions obtenues par le solveur de Riemann exact de Voß [96] appliqué au système de changement de phase avec les solutions obtenues par notre approche de relaxation. La difficulté principale de ces comparaisons réside dans le fait que Voß [96] a utilisé une loi d'état de type Van der Waals avec correction de Maxwell et, pour utiliser cette loi dans notre schéma, il faudrait pouvoir définir la loi de Van der Waals à l'intérieur du dôme de saturation de façon à ce que le système à cinq équation reste hyperbolique.

Ou encore, on pourrait renoncer carrément aux schémas de type «transport-projection» et utiliser des schémas globaux en donnant des valeurs petites mais non nulles au temps de retour aux équilibres thermique, chimique et mécanique (c'est-à-dire aux coefficients de relaxation). À ce titre, un bon candidat serait le schéma de Dumbser *et al.* [32].

* *
*

Afin de simuler la nucléation d'une bulle de vapeur au contact d'une paroi chauffante on a également introduit dans le modèle la diffusion thermique, la gravité et la tension de surface qui, numériquement, sont prises en compte lors de la première étape. En particulier, la diffusion thermique est résolue avec un schéma implicite pour éviter des limitations trop contraignantes sur le pas temporel. Le traitement de la tension de surface quant-à-elle a été implémenté dans sa formulation CSF [17] : elle apparaît sous la forme d'une force volumique étalée sur l'épaisseur de l'interface. En revanche, nous ne nous sommes pas penchés sur la question de l'apparition de courants parasites liés à la discrétisation des termes de capillarité. Celle-ci est une question ouverte sur laquelle on voudrait travailler par la suite en utilisant par exemple la formulation

conservative décrite par Perigaud et Saurel [84]. En outre, on souhaiterait modifier la tension de surface pour qu'elle puisse dépendre de la température.

Remarquons que, pour avoir des simulations d'ébullition nucléée pertinentes, il faudra examiner plus en détail la modélisation et l'implémentation des conditions aux limites. Notamment il semble nécessaire d'approfondir la modélisation de la paroi chauffante ainsi que de prendre en compte l'angle de contact pour mieux évaluer l'évolution de la ligne triple (ligne à la base d'une bulle en contact avec la paroi), ces problématiques n'ayant absolument pas été abordées dans cette étude.

* *
*

Au chapitre 2 nous avons montré que la maximisation de l'entropie, c'est-à-dire la résolution de l'étape ② de l'algorithme, est théoriquement équivalente à la résolution d'une unique équation que nous avons appelée «équation du changement de phase». Nous avons aussi prouvé que cette solution existe et est unique.

Dans le cas de lois d'état simples (comme pour les gaz parfaits décrits au chapitre 5 par exemple) nous avons pu écrire explicitement cette équation.

Pour des lois d'état plus réalistes, comme la loi d'état de type *stiffened gas*, les choses se compliquent : l'équation du changement de phase est définie implicitement par un système de deux équations non linéaires. Malheureusement la résolution de ce système donne des problèmes de convergence et surtout rend l'algorithme trop lent. C'est pourquoi au chapitre 6 nous avons proposé une stratégie de résolution basée sur une approximation au sens des moindres carrés de la courbe de coexistence. Cette stratégie donne une version approchée de l'équation du changement de phase.

Ensuite, au chapitre 7 nous avons étendu cette démarche à des lois d'état quelconques, notamment celles issues des tables expérimentales. Cette stratégie permet en outre de travailler au voisinage du point critique.

Soulignons que, si dans notre modélisation la zone de mélange à l'équilibre ne se trouve que dans quelques mailles de calcul (zone de diffusion de l'interface), cette loi est également valable pour de vrais mélanges physiques utilisés dans certains modèles moyennés.

À ce stade nous avons donc une stratégie très générale pour la simulation d'écoulements avec changements de phase liquide-vapeur où l'étape de changement de phase peut se faire numériquement, une fois pour toutes, avant de faire des simulations numériques d'écoulements.

Les exemples de simulations effectuées (dont une partie est illustrée au chapitre 10) mettent en évidence certains avantages du modèle et de la méthode de relaxation : ils permettent de capturer sur un maillage eulérien des fronts à la topologie complexe et changeante et ils permettent de gérer aisément les transitions de phase dans un cadre purement compressible et sans localisation précise de l'interface.

* *
*

Cette étude peut être considérée comme une exploration des potentialités du modèle de changement de phase à l'équilibre. Elle a en premier lieu apporté une meilleure compréhension des mécanismes responsables de l'ébullition. À l'issue de cette étude, on peut affirmer que le modèle développé est très prometteur pour la simulation numérique d'écoulements liquide-vapeur avec changement de phase : il est thermodynamiquement cohérent et il permet de simuler l'ensemble des phases et des interfaces du système par résolution d'un seul système d'équations, ce qui signifie que les problèmes de coalescence et de rupture sont gérés automatiquement. Les cas tests effectués semblent montrer que l'épaississement numérique de la zone interfaciale reste faible et ceci même sans l'utilisation de schémas antidiffusifs pour la partie «transport». De plus, la méthode peut, *a priori*, être utilisée sur n'importe quel type de maillage (structuré, non structuré, à taille de mailles fixe ou variable).

Ce travail a également permis de mettre en évidence certaines limites des modèles compressibles : il subsiste une forte contrainte du pas de temps liée à la propagation des ondes acoustiques. Cette limitation conduit à de grosses difficultés pour des simulations réalistes d'ébullition nucléée. Ainsi, si on utilise de l'eau, il n'est pas possible pour le moment d'utiliser tous les paramètres physiques mais on doit prendre par exemple une conductivité thermique nettement supérieure à sa valeur physique. Cela explique en partie le fait qu'aucune comparaison avec des données expérimentales n'ait encore été effectuée. L'autre raison à cela est le fait que, puisque seules des simulations bidimensionnelles ont été effectuées, les résultats auraient alors été difficilement comparables à des données expérimentales portant nécessairement sur un système tridimensionnel.

Effectivement, dans la suite immédiate de ce travail on souhaite pouvoir effectuer des comparaisons avec des résultats expérimentaux. Si l'extension à des simulations tridimensionnelles ne devrait poser aucun problème particulier lié au changement de phase (un code tridimensionnel parallélisé pour la partie transport avec des lois d'état de type *Stiffened Gas* a été déjà écrit et testé par Samuel KOKH¹), en revanche il reste encore à adapter la partie «transport» aux lois d'état tabulées (l'étape de changement de phase ayant été décrite au chapitre 7). Notons toutefois que, pour contourner la limitation du pas de temps, il semble désormais nécessaire d'utiliser un solveur implicite pour la partie «transport».

Une fois résolues ces difficultés d'ordre numérique (code tridimensionnel parallélisé avec implication de l'étape de transport et adaptation à des lois issues des tables expérimentales), on pourra finalement comparer les résultats obtenus avec les expériences pour étudier l'ébullition nucléée et la crise d'ébullition se produisant sur une paroi chauffée. On s'intéressera en particulier aux phénomènes suivants : taille des bulles lorsqu'elles se détachent de la paroi, fréquence de détachement des bulles, co-

¹CEA Saclay
DEN/DANS/DM2S/SFME/LETR
91191 Gif-sur-Yvette
samuel.kokh@cea.fr

efficient d'échange thermique à la paroi et influence de l'interaction des bulles sur ces paramètres.

Il nous semble également important d'approfondir la possible prise en compte des états metastables. En effet, notre approche par «concavification» d'une entropie telle qu'elle est ne permet pas d'inclure la métastabilité, comme déjà souligné au chapitre 2.

Bien qu'une modification de la loi de changement de phase soit déjà à l'étude, on peut remarquer que la résolution par décomposition d'opérateurs introduit une sorte de «retard» artificiel du changement de phase qui peut être assimilé, en un certain sens, à un principe de métastabilité «numérique».

Enfin, il sera opportun d'étudier des mélanges binaires, comme cela a été déjà fait pour une méthode du second gradient dans la thèse de Fouillet [37].

Bibliographie

- [1] ALLAIRE, G., CLERC, S. et KOKH, S. (2002). A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids. *J. Comput. Phys.*, 181(2):577–616. (Cité aux pages 17, 18, 23, 245, 247, 248, 249, 256, 261, 263, 265, 266, 267, 279 et 397.)
- [2] ALLAIRE, G., FACCANONI, G. et KOKH, S. (2007). A Strictly Hyperbolic Equilibrium Phase Transition Model. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I*, 344:135–140. (Cité aux pages 16, 78 et 396.)
- [3] ANNAMALAI, K. et PURI, I. K. (2002). *Advanced Thermodynamics Engineering*. CRC Press. (Cité aux pages 34 et 207.)
- [4] AZÉ, D. (1997). *Éléments d'analyse convexe et variationnelle*. Mathématiques pour le deuxième cycle. Ellipses, Paris. (Cité à page 63.)
- [5] BALAY, S., BUSCHELMAN, K., EIJKHOUT, V., GROPP, W. D., KAUSHIK, D., KNEPLEY, M. G., MCINNES, L. C., SMITH, B. F. et ZHANG, H. (2004). PETSc Users Manual. Rapport technique ANL-95/11 - Revision 2.1.5, Argonne National Laboratory. (Cité à page 274.)
- [6] BALAY, S., BUSCHELMAN, K., GROPP, W. D., KAUSHIK, D., KNEPLEY, M. G., MCINNES, L. C., SMITH, B. F. et ZHANG, H. (2001). PETSc Web page. <http://www.mcs.anl.gov/petsc>. (Cité à page 274.)
- [7] BALAY, S., GROPP, W. D., MCINNES, L. C. et SMITH, B. F. (1997). Efficient Management of Parallelism in Object Oriented Numerical Software Libraries. In ARGE, E., BRUASET, A. M. et LANGTANGEN, H. P., éditeurs : *Modern Software Tools in Scientific Computing*, pages 163–202. Birkhäuser Press. (Cité à page 274.)
- [8] BARBER, C. B., DOBKIN, D. P. et HUHDANPAA, H. T. (1996). The Quickhull algorithm for convex hulls. In *ACM Transactions on Mathematical Software*, volume 22, pages 469–483. <http://www.qhull.org/>. (Cité à page 278.)

- [9] BARBERON, T. (2002). *Modélisation mathématique et numérique de la cavitation dans des écoulements multiphasiques compressibles*. Thèse de doctorat, Université de Toulon et du Var. (Cité aux pages 17, 120 et 227.)
- [10] BARBERON, T. et HELLUY, P. (2002). Finite volume simulations of cavitating flows. In *Finite volumes for complex applications, III (Porquerolles, 2002)*, pages 441–448 (electronic). Lab. Anal. Topol. Probab. CNRS, Marseille. (Cité aux pages 39, 86 et 120.)
- [11] BASDEVANT, J.-L., RICH, J. et SPIRO, M. (2002). *Énergie nucléaire*. Éd. de l'École polytechnique. (Cité à page 7.)
- [12] BAUS, M. et TEJERO, C. F. (2007). *Equilibrium Statistical Physics : Phases of Matter and Phase Transitions*. Springer. (Cité à page 63.)
- [13] BENOIST, J. et HIRIART-URRUTY, J. (2006). What is the Subdifferential of the Closed Convex Hull of a Function? *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, 27(6): 1661–1679. (Cité à page 52.)
- [14] BENZONI-GAVAGE, S. et SERRE, D. (2007). *Multidimensional hyperbolic partial differential equations*. Oxford University Press. (Cité aux pages 89 et 114.)
- [15] BETHE, H. (1942). The theory of shock waves for an arbitrary equation of state. *US Army report*, pages 421–492. (Cité aux pages 90 et 91.)
- [16] BOUCHUT, F. (2004). *Nonlinear stability of finite volume methods for hyperbolic conservation laws and well-balanced schemes for sources*. Frontiers in Mathematics. Birkhäuser Verlag, Basel. (Cité à page 17.)
- [17] BRACKBILL, J. U., KOTHE, D. B. et ZEMACH, C. (1992). A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.*, 100(2):335–354. (Cité aux pages 18, 255 et 364.)
- [18] BRACONNIER, B. (2007). *Modélisation numérique d'écoulements multiphasiques pour des fluides compressibles, non miscibles et soumis aux effets capillaires*. Thèse de doctorat, Université de Bordeaux I. (Cité à page 277.)
- [19] CALLEN, H. B. (1972). *Termodinamica*. Tamburini editore. (Cité aux pages 72 et 75.)
- [20] CALLEN, H. B. (1985). *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. John Wiley & sons, second édition. (Cité aux pages 28, 34, 35, 36, 49, 50, 63, 69, 71 et 72.)
- [21] CARO, F. (2004). *Modélisation et simulation numérique des transitions de phase liquide-vapeur*. Thèse de doctorat, École Polytechnique. (Cité aux pages 17, 23, 49, 79, 86, 120 et 245.)

- [22] CARO, F., COQUEL, F., JAMET, D. et KOKH, S. (2005a). DINMOD : a diffuse interface model for two-phase flows modelling. In *Numerical methods for hyperbolic and kinetic problems*, volume 7 de *IRMA Lect. Math. Theor. Phys.*, pages 209–237. Eur. Math. Soc., Zürich. (Cité aux pages 49, 79, 86, 225, 228 et 252.)
- [23] CARO, F., COQUEL, F., JAMET, D. et KOKH, S. (2005b). Phase Change Simulation for Isothermal Compressible Two-Phase Flows. *17 th AIAA Computational Flow Dynamics Conference*, (4697):1–10. (Cité aux pages 49, 79, 86 et 120.)
- [24] CARO, F., COQUEL, F., JAMET, D. et KOKH, S. (2006). A Simple Finite-Volume Method for Compressible Isothermal Two-Phase Flows Simulation. *Int. J. on Finite Volumes*, 3(1). (Cité aux pages 17, 23, 49, 79, 86, 120, 225, 227, 228, 252 et 360.)
- [25] CHANTEPERDRIX, G. (2004). *Modélisation et simulation numérique d'écoulements diphasiques à interface libre. Application à l'étude des mouvements de liquides dans le réservoirs de véhicules spatiaux*. Thèse de doctorat, École Nationale Supérieure de l'aéronautique et de l'espace. (Cité aux pages 256, 277 et 278.)
- [26] CHEN, G. Q., LEVERMORE, C. D. et LIU, T.-P. (1994). Hyperbolic conservation laws with stiff relaxation terms and entropy. *Comm. Pure Appl. Math.*, 47(6):787–830. (Cité aux pages 17 et 227.)
- [27] COQUEL, F. et PERTHAME, B. (1998). Relaxation of energy and approximate Riemann solvers for general pressure laws in fluids dynamics. *SIAM J. Numer. Anal.*, 35(6):2223–2249. (Cité aux pages 17, 227 et 397.)
- [28] CORREIA, J., LEFLOCH, P. G. et THANH, M. D. (2001). Hyperbolic systems of conservation laws with Lipschitz continuous flux-functions : the Riemann problem. *Bol. Soc. Brasil. Mat. (N.S.)*, 32(3):271–301. Dedicated to Constantine Dafermos on his 60th birthday. (Cité aux pages 118 et 119.)
- [29] CORRIAS, L. (1996). Fast Legendre-Fenchel transform and applications to Hamilton-Jacobi equations and conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.*, 33(4): 1534–1558. (Cité aux pages 47 et 278.)
- [30] DELLACHERIE, S. (2002). Relations de fermeture pour le système des équations d'Euler multi-espèces. Construction et étude de schémas de relaxation en multi-espèces et en multi-constituants. Rapport technique, CEA Saclay. (Cité à page 227.)
- [31] DESPRÉS, B. et LAGOUTIÈRE, F. (2001). Contact discontinuity capturing schemes for linear advection and compressible gas dynamics. *J. Sci. Comput.*, 16(4):479–524 (2002). (Cité à page 359.)
- [32] DUMBSER, M., ENAUX, C. et TORO, E. F. (2008). Finite volume schemes of very high order of accuracy for stiff hyperbolic balance laws. *J. Comput. Phys.*, 227(8): 3971–4001. (Cité aux pages 257, 359 et 364.)
- [33] DUVAL, G. et GRAHAM, R. (1977). Phase transitions under shock-wave loading. *Reviews of Modern Physics*, 49(3):523–579. (Cité à page 91.)

- [34] EVANS, L. (1998). *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society. (Cité à page 83.)
- [35] FACCANONI, G., KOKH, S. et ALLAIRE, G. (2008). Numerical Simulation with Finite Volume of Dynamic Liquid-Vapor Phase Transition. *In Proceedings of the 5nd International Symposium on : FINITE VOLUMES FOR COMPLEX APPLICATIONS - PROBLEMS AND PERSPECTIVES, Aussois (2008)*, pages 391–398. ISTE and Wiley. (Cité aux pages 18, 180 et 398.)
- [36] FAN, H. (1998). Traveling waves and Riemann problems and computations of a model of the dynamics of liquid/vapor phase transitions. *D. Diff. Eq.*, 150:385–437. (Cité aux pages 118 et 363.)
- [37] FOUILLET, C. (2003). *Généralisation à des mélanges binaires de la méthode du second gradient et application à la simulation numérique directe de l'ébullition nucléée*. Thèse de doctorat, Université Paris 6. (Cité aux pages 15, 324 et 367.)
- [38] GAVRILYUK, S. et GOUIN, H. (1999). A new form of governing equations of fluids arising from Hamilton's principle. *Int. Journal of Eng. Sci.*, 37:1495–1520. (Cité aux pages 23, 225, 227 et 252.)
- [39] GAVRILYUK, S. et SAUREL, R. (2002). Mathematical and numerical modeling of two-phase compressible flows with micro-inertia. *J. Comp. Phys.*, 175:326–360. (Cité aux pages 23, 225, 227 et 252.)
- [40] GODLEWSKI, E. et RAVIART, P.-A. (1991). *Hyperbolic Systems of Conservation Laws*, volume 3/4 de *Mathématiques & Applications (Paris) [Mathematics and Applications]*. Ellipses, Paris. (Cité à page 114.)
- [41] GODLEWSKI, E. et RAVIART, P.-A. (1996). *Numerical Approximation of Hyperbolic Systems of Conservation Laws*, volume 118. Springer. (Cité aux pages 89, 90, 114 et 265.)
- [42] GOSSE, L. (2000). A well-balanced flux-vector splitting scheme designed for hyperbolic systems of conservation laws with source terms. *Comput. Math. Appl.*, 39(9-10):135–159. (Cité à page 275.)
- [43] GOSSE, L. (2001). A nonconservative numerical approach for hyperbolic systems with source terms : the well-balanced schemes. *In Hyperbolic problems : theory, numerics, applications, Vol. I, II (Magdeburg, 2000)*, volume 141 de *Internat. Ser. Numer. Math.*, 140, pages 453–461. Birkhäuser, Basel. (Cité à page 275.)
- [44] GREINER, W., NEISE, L. et STÖCKER, H. (1997). *Thermodynamics and statistical mechanics*. Springer. (Cité aux pages 28, 32, 34, 57, 63, 67 et 72.)
- [45] GUILLEMAUD, V. (2007). *Modélisation et simulation numérique des écoulements diphasiques par une approche bifluide à deux pressions*. Thèse de doctorat, Université de Provence Aix-Marseille I. (Cité à page 227.)

- [46] HELLUY, P. (2005). Quelques exemples de méthodes numériques récentes pour le calcul des écoulements multiphasiques. Mémoire d'habilitation à diriger des recherches. (Cité aux pages 17, 38, 44, 46, 86, 120, 145, 227, 240, 362 et 397.)
- [47] HELLUY, P. et BARBERON, T. (2003). Finite Volume Simulation of Cavitating Flows. Rapport technique 4824, INRIA. (Cité à page 227.)
- [48] HELLUY, P. et SEGUIN, N. (2006). Relaxation models of phase transition flows. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 40(2):331–352. (Cité aux pages 17, 44, 46, 86, 120, 145, 227, 362 et 397.)
- [49] HENDERSON, L. (2001). General Laws for Propagation of Shock Waves through Matter. *Handbook of Shock Waves*, 1. (Cité aux pages 90 et 91.)
- [50] HEUZÉ, O. (2007). Propagation des ondes mécaniques dans des milieux à isentropes changeant de concavité. Rapport technique 6146, CEA, CEA / Saclay 91191 Gif-sur-Yvette Cedex France. (Cité aux pages 118, 119 et 363.)
- [51] HIBIKI, T. et ISHII, M. (2006). *Thermo-Fluid Dynamics of Two-Phase Flow*. Springer.
- [52] HIRIART-URRUTY, J. et LEMARÉCHAL, C. (1993). *Convex Analysis and Minimization Algorithms*. Springer-Verlag. (Cité à page 63.)
- [53] HIRIART-URRUTY, J. et LEMARECHAL, C. (1993). Convex Analysis and Minimization Algorithms. II. Advanced Theory and Bundle Methods. *Grundlehren Math. Wiss.*, 306. (Cité à page 63.)
- [54] HIRIART-URRUTY, J. et LEMARÉCHAL, C. (2001). *Fundamentals of Convex Analysis*. Springer. (Cité aux pages 50 et 63.)
- [55] JAMET, D. (1998). *Etude des potentialités de la théorie du second gradient pour la simulation numérique directe des écoulements liquide-vapeur avec changement de phase*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale Paris. (Cité à page 15.)
- [56] JAMET, D., LEBAGUE, O., COUTRIS, N. et DELHAYE, J. M. (2001). The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid-vapor flows with phase change. *J. Comp. Phys.*, 169:624–651. (Cité à page 15.)
- [57] JAMET, D., TORRES, D. et BRACKBILL, J. (2002). On the theory and computation of surface tension : the elimination of parasitic currents through energy conservation in the second-gradient method. *Journal of Computational Physics*, 182(1):262–276. (Cité à page 277.)
- [58] JAOUEN, S. (2001). *Étude mathématique et numérique de stabilité pour des modèles hydrodynamiques avec transition de phase*. Thèse de doctorat, Université Paris 6, France. (Cité aux pages 16, 49, 86, 118, 119, 120, 145, 226, 360, 363 et 397.)
- [59] KEENAN, J., KEYES, F. G., HILL, P. G. et MOORE, J. G. (1978). *Steam Tables*. Wiley New York. (Cité à page 207.)

- [60] KOKH, S. (2001). *Aspects numériques et théoriques de la modélisation des écoulements diphasiques compressibles par des méthodes de capture d'interfaces*. Thèse de doctorat, Université Paris 6. (Cité aux pages 17, 18, 23, 245, 247, 249, 256, 261, 266, 267 et 279.)
- [61] KOKH, S. et LAGOUTIÈRE, F. (2008). An Anti-Diffusive Method for Simulating Compressible Two-Phase Flows with Interfaces. *In Proceedings of the 5th International Symposium on : FINITE VOLUMES FOR COMPLEX APPLICATIONS - PROBLEMS AND PERSPECTIVES, Aussois (2008)*, pages 519–526. ISTE and Wiley. (Cité aux pages 268, 359 et 364.)
- [62] KULIKOVSKII, A. G., POGORELOV, N. V. et SEMENOV, A. Y. (2001). *Mathematical aspects of numerical solution of hyperbolic systems*, volume 118 de *Chapman & Hall/CRC Monographs and Surveys in Pure and Applied Mathematics*. Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL. (Cité aux pages 89, 90 et 114.)
- [63] LAMBRAKIS, K. et THOMPSON, P. (2003). Existence of Real Fluids with a Negative Fundamental Derivative Γ . *Physics of Fluids*, 15:933. (Cité à page 90.)
- [64] LANDAU, L. D. et LIFSHITZ, E. M. (1959). *Fluid mechanics*, volume 6 de *Course of Theoretical Physics. Translated from the Russian by J. B. Sykes and W. H. Reid*. Pergamon Press, London. (Cité aux pages 254 et 255.)
- [65] LE METAYER, O. (2003). *Modélisation et résolution de la propagation de fronts perméables : application aux fronts d'évaporation et de détonation*. Thèse de doctorat, Université de Provence (Aix-Marseille 1). (Cité aux pages 160, 163, 176, 186, 187 et 188.)
- [66] LE METAYER, O., MASSONI, J. et SAUREL, R. (2004). Elaborating equations of state of a liquid and its vapor for two-phase flow models. *International Journal of Thermal Sciences*, 43(3):265–276. (Cité aux pages 163, 176, 186, 187 et 188.)
- [67] LE MÉTAYER, O., MASSONI, J. et SAUREL, R. (2005). Modelling evaporation fronts with reactive Riemann solvers. *J. Comput. Phys.*, 205:567–610. (Cité aux pages 86 et 120.)
- [68] LEFLOCH, P. (2002). *Hyperbolic Systems of Conservation Laws : The Theory of Classical and Nonclassical Shock Waves*. Birkhauser. (Cité à page 363.)
- [69] LEMMON, E., McLINDEN, M. et FRIEND, D. (2005). *Thermophysical Properties of Fluid Systems*. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899. <http://webbook.nist.gov>. (Cité aux pages 34, 187, 189, 191, 198, 203, 207, 208 et 215.)
- [70] LEVEQUE, R. J. (1990). *Numerical methods for conservation laws*. Birkhäuser Verlag, Berlin. (Cité à page 114.)

-
- [71] LEVEQUE, R. J. (2002). *Finite volume methods for hyperbolic problems*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, Cambridge. (Cité à page 114.)
 - [72] LEVEQUE, R. J. et YEE, H. C. (1990). A study of numerical methods for hyperbolic conservation laws with stiff source terms. *J. Comp. Phys*, 86:187–210. (Cité à page 295.)
 - [73] LINDER, B. (2004). *Thermodynamics and Introductory Statistical Mechanics*. Hoboken. NJ : Wiley Interscience. (Cité à page 63.)
 - [74] LIU, T.-P. (1977). The Riemann Problem for General Systems of Conservation Laws. *J. Diff. Eq.*, 18:218–234. (Cité aux pages 116 et 117.)
 - [75] LOTT, M. (1993). *Bases de thermodynamique classique*. Commissariat à l’Energie Atomique (CEA). (Cité à page 63.)
 - [76] LUCET, Y. (1996). A fast computational algorithm for the Legendre-Fenchel transform. *Comput. Optim. Appl.*, 6(1):27–57. (Cité aux pages 47 et 278.)
 - [77] LUCET, Y. (1997). Faster than the fast Legendre transform, the linear-time Legendre transform. *Numer. Algorithms*, 16(2):171–185 (1998). (Cité aux pages 47 et 278.)
 - [78] MATOLCSI, T. (1996). On the classification of phase transitions. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik (ZAMP)*, 47(6):837–857. (Cité aux pages 34 et 35.)
 - [79] MEKKAS, A. (2008). Modélisation et simulation numérique d’écoulements de gaz soumis à un champ de gravité. Mémoire de D.E.A., IUSTI - Institut Universitaire des Systèmes Thermiques Industriels. (Cité à page 275.)
 - [80] MENIKOFF, R. et PLOHR, B. (1989). The Riemann Problem for Fluid Flow of Real Materials. *Reviews of Modern Physics*, 61(1):75–130. (Cité aux pages 16, 90, 97, 98, 100, 103, 105, 118, 119, 120, 363 et 397.)
 - [81] MÜLLER, S. et VOSS, A. (2006). The Riemann problem for the Euler equations with nonconvex and nonsmooth equation of state : construction of wave curves. *SIAM J. Sci. Comput.*, 28(2):651–681 (electronic). (Cité aux pages 90, 118, 119 et 363.)
 - [82] MURRONE, A. et GUILLARD, H. (2005). A five equation reduced model for compressible two phase flow problems. *J. Comput. Phys.*, 202(2):664–698. (Cité à page 247.)
 - [83] O’ROURKE, J. (1998). *Computational Geometry in C*. Cambridge University Press. (Cité à page 278.)
 - [84] PERIGAUD, G. et SAUREL, R. (2005). A compressible flow model with capillary effects. *J. Comput. Phys.*, 209(1):139–178. (Cité aux pages 256, 277 et 365.)

- [85] PERRIER, V. (2007). *Modélisation et simulation d'écoulements multiphasiques avec ou sans changement de phase. Application à l'interaction laser-plasma*. Thèse de doctorat, Université de Bordeaux I. (Cité aux pages 105 et 145.)
- [86] PETITPAS, F., FRANQUET, E., SAUREL, R. et LE METAYER, O. (2007). A relaxation-projection method for compressible flows. II. Artificial heat exchanges for multiphase shocks. *J. Comput. Phys.*, 225(2):2214–2248. (Cité à page 86.)
- [87] RUYER, P. (2006). *Modèle de champ de phase pour l'étude de l'ébullition*. Thèse de doctorat, École Polytechnique. (Cité à page 16.)
- [88] SAUREL, R. et ABGRALL, R. (1999). A simple method for compressible multifluid flows. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(3):115–1145 (electronic). (Cité aux pages 17 et 227.)
- [89] SAUREL, R., FRANQUET, E., DANIEL, E. et LE METAYER, O. (2007). A relaxation-projection method for compressible flows. I. The numerical equation of state for the Euler equations. *J. Comput. Phys.*, 223(2):822–845.
- [90] SAUREL, R., PETITPAS, F. et ABGRALL, R. (2008). Modelling phase transition in metastable liquids : application to cavitating and flashing flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 607:313–350. (Cité à page 163.)
- [91] SERRE, D. (1996). Systèmes de lois de conservation I (hyperbolicité, entropies, ondes de choc). *Fondations Paris*. (Cité aux pages 114 et 120.)
- [92] THOMPSON, P. (2003). A Fundamental Derivative in Gasdynamics. *Physics of Fluids*, 14:1843. (Cité à page 90.)
- [93] TORO, E. F. (1999). *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics*. Springer-Verlag, Berlin, second édition. A practical introduction. (Cité aux pages 252, 265 et 363.)
- [94] VAN WYLEN, G. et SONNTAG, R. (1986). *Fundamentals of Classical Thermodynamics*. Wiley New York, 3 édition. (Cité à page 207.)
- [95] VIGNEAUX, P. (2007). *Méthodes Level Set pour des problèmes d'interface en microfluidique*. Thèse de doctorat, Université de Bordeaux I. (Cité à page 277.)
- [96] VOSS, A. (2005). *Exact Riemann Solution for the Euler Equations with Nonconvex and Nonsmooth Equation of State*. Thèse de doctorat, Rheinisch-Westfälischen. (Cité aux pages 16, 86, 90, 91, 110, 118, 119, 120, 226, 252, 359, 360, 363, 364 et 397.)
- [97] WINTERBONE, D. (1997). *Advanced thermodynamics for engineers*. Wiley. (Cité à page 63.)

TROISIÈME PARTIE .

PUBLICATIONS

- ① *A strictly hyperbolic equilibrium phase transition model*
Grégoire ALLAIRE, Gloria FACCANONI et Samuel KOKH.
Publié dans les *Compte Rendu de l'Académie des Sciences de Paris*.
Sér. I, 344:(2007), pages 135–140 ;

- ② *Numerical Simulation with Finite Volume of Dynamic Liquid-Vapor Phase Transition*
Gloria FACCANONI, Samuel KOKH et Grégoire ALLAIRE.
Publié dans les Actes du congrès *5nd International Symposium on : FINITE VOLUMES FOR COMPLEX APPLICATIONS - PROBLEMS AND PERSPECTIVES*, *Aussois*.
ISTE and Wiley, (2008), pages 391–398 ;



Available online at www.sciencedirect.com



C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 344 (2007) 135–140



<http://france.elsevier.com/direct/CRASS1/>

Mathematical Problems in Mechanics

A strictly hyperbolic equilibrium phase transition model

Grégoire Allaire^a, Gloria Faccanoni^b, Samuel Kokh^b

^a CMAP, École Polytechnique, CNRS, 91128 Palaiseau, France

^b DAN/DENS/DM2S, Commissariat à l'Énergie Atomique, Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France

Received 17 October 2006; accepted 7 November 2006

Available online 11 December 2006

Presented by Philippe G. Ciarlet

Abstract

This Note is concerned with the strict hyperbolicity of the compressible Euler equations equipped with an equation of state that describes the thermodynamical equilibrium between the liquid phase and the vapor phase of a fluid. The proof is valid for a very wide class of fluids. The argument only relies on smoothness assumptions and on the classical thermodynamical stability assumptions, that requires a definite negative Hessian matrix for each phase entropy as a function of the specific volume and internal energy. *To cite this article: G. Allaire et al., C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 344 (2007).*

© 2006 Académie des sciences. Published by Elsevier Masson SAS. All rights reserved.

Résumé

Un modèle strictement hyperbolique de changement de phase à l'équilibre. Cette Note a pour but de démontrer la stricte hyperbolicité des équations d'Euler de la mécanique des fluides compressible lorsque le système est fermé par une équation d'état qui décrit l'équilibre thermodynamique d'un fluide entre sa phase liquide et sa phase vapeur. La preuve que nous proposons est valable pour une large classe de fluide. En effet, outre une hypothèse de régularité, les seules hypothèses nécessaires sont celles qui qualifient classiquement la stabilité d'un corps pur homogène : chaque phase doit être munie d'une entropie dont la matrice hessienne est définie négative relativement aux variables de volume et d'énergie interne spécifiques. *Pour citer cet article : G. Allaire et al., C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 344 (2007).*

© 2006 Académie des sciences. Published by Elsevier Masson SAS. All rights reserved.

Version française abrégée

Nous proposons dans cette Note de démontrer le caractère strictement hyperbolique des équations d'Euler fermées par une loi d'état décrivant l'équilibre liquide–vapeur à saturation. Ce travail est motivé par l'étude du caractère bien-posé des systèmes utilisés pour la description des phénomènes de changement de phase liquide–vapeur [1,2,5,10–12,14].

Le système diphasique que nous considérons est constitué de deux phases $\alpha = 1, 2$ représentant respectivement la vapeur et le liquide. Chaque phase est supposée munie d'une loi d'état $s_\alpha : w_\alpha = (\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \mapsto s_\alpha$ où $\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha, s_\alpha$ sont respectivement le volume, l'énergie interne et l'entropie spécifiques de la phase $\alpha = 1, 2$. Nous supposons que les

E-mail addresses: gregoire.allaire@polytechnique.fr (G. Allaire), gloria.faccanoni@cea.fr (G. Faccanoni), samuel.kokh@cea.fr (S. Kokh).

hypothèses classiques de stabilité d'un corps pur données par les inégalités (2) sont vérifiées pour s_α , de même que la positivité des variables d'états $\tau_\alpha \geq 0$ et $\varepsilon_\alpha \geq 0$, $\alpha = 1, 2$. Nous nous donnons la loi d'état de notre système diphasique par la donnée d'une fonction entropie spécifique $(w_1, w_2, y) \mapsto \sigma$ définie classiquement (voir [4]) par la relation (3), où y est la fraction de masse de la phase 1. Enfin, si l'on note $w = (\tau, \varepsilon)$ le volume et l'énergie interne spécifiques du système diphasique, alors par additivité des volumes et des énergies, pour un état $w = (\tau, \varepsilon) \in \mathcal{C} = \{\tau \geq 0, \varepsilon \geq 0\}$, on a $(w_1, w_2, y) \in \mathcal{Q} = \{0 \leq \tau_\alpha \leq \tau, 0 \leq \varepsilon_\alpha \leq \varepsilon, 0 \leq y \leq 1 \mid w = yw_1 + (1-y)w_2\}$.

Si l'on suppose qu'à chaque instant le système atteint instantanément l'équilibre entre le liquide et la vapeur, alors l'application du second principe de la thermodynamique nous indique que pour une valeur $w = (\tau, \varepsilon) \in \mathcal{C}$ donnée, la composition (w_1^*, w_2^*, y^*) du système sera telle que l'entropie $\sigma(w_1, w_2, y)$ est maximale. Suivant [2], nous traduisons cette hypothèse en dotant le système diphasique d'une nouvelle fonction entropie $w \mapsto s^{\text{eq}}$ définie par la relation (4) qui réalise la maximisation de σ à w donné. La stricte concavité de $(w_1, w_2, y) \mapsto \sigma$ et un argument basé sur l'inf-convolution de fonctions convexes nous assure que la définition (4) est consistante et que $w \mapsto s^{\text{eq}}$ est concave [2,10,11].

Il est bien connu que la stricte positivité de la vitesse du son, définie en (1), assure la stricte hyperbolicité du système des équations d'Euler : nous démontrons ici qu'effectivement c est strictement positive. Notons que la concavité de $w \mapsto s^{\text{eq}}$ implique que $c^2 \geq 0$ et donc que le système est toujours à caractéristiques réelles comme montré dans [1,2] et [14] où sont présentés des calculs pour le cas où les fluides $\alpha = 1, 2$ sont des stiffened gaz. Il est néanmoins nécessaire de poursuivre l'analyse car la concavité non-strictes de $w \mapsto s^{\text{eq}}$ ne permet pas de conclure. En effet, on ne peut a priori écarter des cas où la vitesse du son s'annulerait de la même manière que pour les systèmes étudiés par [5–8] menant à une jacobienne associée au flux non-diagonalisable bien qu'à spectre réel.

Afin de mener à bien cette analyse nous commençons par rappeler trois propositions. Tout d'abord la Proposition 2.1, qui est un résultat classique de thermodynamique [2,4] (utilisé à des fins de simulation numérique par [5–8,12]), décrit les états d'équilibre du système en optimisant la composition (w_1, w_2, y) . Ensuite la Proposition 2.2 fournit une interprétation de cet équilibre via une construction géométrique de l'entropie d'équilibre s^{eq} basée sur l'analyse des bitangentes des graphes associées aux fonctions $w_\alpha \mapsto s_\alpha$. On définit grâce à cette proposition les états du système pour lesquels il y a coexistence de vapeur et de liquide à l'équilibre (états à saturation). Enfin, la Proposition 2.3 établit l'équivalence de l'épigraphe de $w \mapsto s^{\text{eq}}$ avec l'enveloppe concave de l'ensemble $\{(w, s) \mid s \leq \max[s_1(w), s_2(w)]\}$. Cette dernière proposition établit que le graphe de $w \mapsto s^{\text{eq}}$ dans les zones d'états à saturation est constitué de segments de l'espace (τ, ε, s) sur lesquels la pression, la température et le potentiel chimique sont constants. Ceci prouve que $w \mapsto s^{\text{eq}}$ n'est effectivement pas strictement concave.

Grâce à une hypothèse de régularité par morceaux (voir [3]) de s^{eq} , nous démontrons ensuite le Théorème 2.4 qui examine la matrice hessienne de $w \mapsto s^{\text{eq}}$ dans les zones d'états à saturation, ainsi que la valeur de la pression et de la température du système. Finalement, en réinjectant ces résultats dans la définition de la vitesse du son (1), on conclut au Théorème 3.1 que la vitesse du son ne peut pas s'annuler.

1. Introduction

The goal of the present Note is to prove that the compressible Euler system equipped with an equation of state (EOS) that describes the liquid–vapor thermodynamical equilibrium is strictly hyperbolic. This result is valid when the EOS for the liquid and the vapor phases satisfy the classical thermodynamical stability hypotheses for a pure homogeneous fluid. This work has been motivated by the well-posedness study of two-phase systems used to model liquid–vapor phase change phenomena.

2. Equilibrium phase transition model

Before describing the two-phase system we shall examine here, let us first briefly recall a few statements of classical thermodynamics (see [4]). We consider transformations of a pure fluid whose state is described by the variable $w(\tau, \varepsilon)$ lying in the cone $\mathcal{C} = \{\tau \geq 0, \varepsilon \geq 0\}$, where τ and ε are respectively the specific volume and the specific internal energy. We denote by $s : w \mapsto s(w)$ the specific entropy of the system. In the following we suppose that s is a \mathcal{C}^2 regular function and we shall use the notations

$$s_\varepsilon = \frac{\partial s}{\partial \varepsilon} \Big|_\tau, \quad s_\tau = \frac{\partial s}{\partial \tau} \Big|_\varepsilon, \quad s_{\varepsilon\varepsilon} = \frac{\partial^2 s}{\partial \varepsilon^2} \Big|_\tau, \quad s_{\tau\tau} = \frac{\partial^2 s}{\partial \tau^2} \Big|_\varepsilon, \quad s_{\tau\varepsilon} = \frac{\partial^2 s}{\partial \tau \partial \varepsilon}.$$

The temperature T , the pressure P , the free enthalpy g and the speed of sound c are defined by

$$(T, P) = (1/s_\varepsilon, s_\tau/s_\varepsilon), \quad g = \varepsilon + P\tau - Ts, \quad c^2 = -\tau^2 T \begin{bmatrix} P & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_{\varepsilon\varepsilon} & s_{\tau\varepsilon} \\ s_{\tau\varepsilon} & s_{\tau\tau} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (1)$$

Thermodynamics characterizes the derivatives of s : first, temperature and pressure strict positivity require s to be a strictly increasing function of ε and τ ; secondly, a stability assumption is enforced by assuming a definite negative Hessian matrix for s . Therefore for all $\mathbf{w} \in \mathcal{C}$, we have

$$(A) \ s_\varepsilon > 0, \ s_\tau > 0, \quad (B) \ s_{\varepsilon\varepsilon}s_{\tau\tau} > (s_{\tau\varepsilon})^2, \quad (C) \ s_{\varepsilon\varepsilon} < 0 \text{ (or equivalently } s_{\tau\tau} < 0). \quad (2)$$

Let us note that the above relation implies that $\mathbf{w} \mapsto s$ is strictly concave. Finally, we also assume that the entropy admits an upper bound in the vicinity of the line $\tau = 0$ and the line $\varepsilon = 0$.

We now turn to the description of the two-phase system investigated in the present Note: the system consists of two fluids $\alpha = 1, 2$ that represent the vapor phase and the liquid phase. Each phase is equipped with a complete EOS $s_\alpha : \mathbf{w}_\alpha = (\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \mapsto s_\alpha$, where τ_α , ε_α and s_α denote respectively the specific volume, internal energy and entropy of the phase $\alpha = 1, 2$. In the following we suppose that s_α is \mathcal{C}^2 and verifies the inequalities (2) for $\alpha = 1, 2$. The system composition is characterized by the mass fraction $y \in [0, 1]$ of the phase 1. We note $\mathbf{w} = (\tau, \varepsilon) \in \mathcal{C}$ the fluid system global specific volume and specific internal energy. The additivity of the volume and the energy implies that

$$(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y) \in \mathcal{Q}(\mathbf{w}) = \{0 \leq \tau_\alpha \leq \tau, \ 0 \leq \varepsilon_\alpha \leq \varepsilon, \ 0 \leq y \leq 1 \mid \mathbf{w} = y\mathbf{w}_1 + (1-y)\mathbf{w}_2\}.$$

Following classical thermodynamics (see [4]) we define an entropy for a phase mixture:

$$\sigma(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y) = ys_1(\mathbf{w}_1) + (1-y)s_2(\mathbf{w}_2) \quad \text{with } (\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y) \in \mathcal{C} \times \mathcal{C} \times [0, 1]. \quad (3)$$

According to the second law of thermodynamics, for a given global state $\mathbf{w} = (\tau, \varepsilon) \in \mathcal{C}$ the equilibrium composition parameters $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y^*)$ are characterized as maximizer of $(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y) \mapsto \sigma$. Following Ph. Helluy and T. Barberon in [2], if we consider that the fluid always instantaneously reaches equilibrium then we provide the system with a new entropy definition:

$$s^{\text{eq}}(\mathbf{w}) = \max_{(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y) \in \mathcal{Q}(\mathbf{w})} \sigma(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y). \quad (4)$$

Ph. Helluy and N. Seguin show in [11] that the optimization problem (4) is equivalent to perform an inf-convolution between two convex functions. This result ensures that $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ is always concave and therefore that the mixture speed of sound satisfies $c \geq 0$. Numerical computations of s^{eq} for the special cases of two stiffened gases are available in [1]. Under hypothesis (2), the maximization in (4) admits a solution which is given by the following result (see [2,10]):

Proposition 2.1 (Extremum principle). *($\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, y) \mapsto \sigma$ is a \mathcal{C}^2 concave function over $\mathcal{C} \times \mathcal{C} \times [0, 1]$ and for a given $\mathbf{w} \in \mathcal{C}$ the equilibrium state $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y^*) \in \mathcal{Q}(\mathbf{w})$ is the solution of the optimization problem (4) if and only if*

$$\begin{cases} y^* = 1, \\ s_1(\mathbf{w}) > s_2(\mathbf{w}) \end{cases} \quad \text{or} \quad \begin{cases} y^* = 0, \\ s_1(\mathbf{w}) < s_2(\mathbf{w}) \end{cases} \quad \text{or} \quad (\text{MZ}) \quad \begin{cases} 0 < y^* < 1, \\ \left(\frac{1}{T_1}, \frac{P_1}{T_1}, \frac{g_1}{T_1}\right)(\mathbf{w}_1^*) = \left(\frac{1}{T_2}, \frac{P_2}{T_2}, \frac{g_2}{T_2}\right)(\mathbf{w}_2^*). \end{cases}$$

We observe that in many cases the maximum is reached at a point on the boundary $y^* \in \{0, 1\}$ of the set $\mathcal{Q}(\mathbf{w})$.

In the following we assume that:

$$0 < y^* < 1 \quad \Rightarrow \quad \{\tau_1^* \neq \tau_2^*, \varepsilon_1^* \neq \varepsilon_2^*, s_1(\mathbf{w}_1^*) \neq s_2(\mathbf{w}_2^*)\}. \quad (5)$$

This is a property for a liquid–vapor phase transition as described, for example, in [4, p. 228].

The optimization procedure (4) also reads as a convexification of $\mathbf{w} \mapsto \max\{s_1(\mathbf{w}), s_2(\mathbf{w})\}$. This approach allows to define the saturation state for the fluid (see [4]) and has been exploited in [5–8,12] within a numerical simulation framework. Following [4–8,12] we recall below the geometrical result that characterizes the solution of (4).

Proposition 2.2 (Bitangent plane). *Let S_α be the surface of $\mathbf{w} \mapsto s_\alpha$ in the (\mathbf{w}, s) space. Let $\mathbf{w} \in \mathcal{C}$, if $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y^*) \in \mathcal{Q}(\mathbf{w})$ maximizes σ and $0 < y^* < 1$, then there is a unique plane, called ‘bitangent plane’, tangent to S_1 at the*

point (\mathbf{w}_1^*, s_1^*) and to S_2 at the point (\mathbf{w}_2^*, s_2^*) . For such $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y^*)$, the state $\mathbf{w} = y^* \mathbf{w}_1^* + (1 - y^*) \mathbf{w}_2^*$ is called a 'saturated state'.

Consequently solving (4) leads either to $y^* \in \{0, 1\}$ or to find the bitangent plane to S_1 and S_2 .

We now recall a classical result (see [4,12]) that connects the optimization problem (4) and the bitangent plane construction of Proposition 2.2.

Proposition 2.3 (Concave hull). *Let S be the graph of s^{eq} in the (\mathbf{w}, s) space. The set S is the concave hull of the set $\{(\mathbf{w}, s) \mid s \leq \max[s_1(\mathbf{w}), s_2(\mathbf{w})]\}$. Therefore for every 'saturated state' $\mathbf{w} \in \mathcal{C}$ the surface S contains a segment passing through the point $(\mathbf{w}, s^{\text{eq}}(\mathbf{w}))$. Along this segment P , T and g are constant.*

In full generality $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ is not \mathcal{C}^2 but merely \mathcal{C}^1 [3]. We assume that it is piecewise \mathcal{C}^2 in the sense that the mixture zone defined by (MZ) is a \mathcal{C}^2 manifold with a boundary which is a \mathcal{C}^1 closed loop curve. We introduce a new technical result in the following theorem that investigates some of the properties of $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$:

Theorem 2.4. *Let $\mathbf{w} \in \mathcal{C}$ be a 'saturated state', then*

- (I) *there exists a single couple of points $\mathbf{M}_1^* = (\mathbf{w}_1^*, s_1^* = s_1(\mathbf{w}_1^*)) \in S_1$ and $\mathbf{M}_2^* = (\mathbf{w}_2^*, s_2^* = s_2(\mathbf{w}_2^*)) \in S_2$ such that $\mathbf{M} = (\mathbf{w}, s^{\text{eq}}(\mathbf{w}))$ belongs to the line segment $\tau_{12} = (\mathbf{M}_1^*, \mathbf{M}_2^*) = \{y\mathbf{M}_1^* + (1 - y)\mathbf{M}_2^* \mid y \in [0, 1]\}$.*

Moreover, for every point of the straight line segment τ_{12} we have

$$\begin{aligned} \text{(II)} \quad & \begin{cases} s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}}(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) + s_{\tau\tau}^{\text{eq}}(\tau_1^* - \tau_2^*) = 0, \\ s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}}(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) + s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}}(\tau_1^* - \tau_2^*) = 0, \end{cases} \quad s_{\tau\tau}^{\text{eq}} s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} = (s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}})^2, \quad s_{\tau\tau}^{\text{eq}} = \left(\frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*} \right)^2 s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}}, \\ \text{(III)} \quad & s_{\tau\tau}^{\text{eq}} < 0, \quad s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}} < 0, \quad s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}} \neq 0; \\ \text{(IV)} \quad & P \neq -\frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*}, \quad T \neq \frac{\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*}{s_1^* - s_2^*}. \end{aligned}$$

Proof. (I) The existence of the segment τ_{12} follows from Proposition 2.3. We prove the uniqueness: s_α is strictly concave and increasing according to τ and ε then there is a bijection with (P, T) and \mathbf{w}_α . If $\tilde{\tau}_{12} = ((\tilde{\mathbf{w}}_1^*, \tilde{s}_1^*), (\tilde{\mathbf{w}}_2^*, \tilde{s}_2^*))$ is such that $(\mathbf{w}, s^{\text{eq}}(\mathbf{w})) \in \tau_{12} \cap \tilde{\tau}_{12}$, as (P, T, g) are constant along τ_{12} and $\tilde{\tau}_{12}$, we have $\mathbf{w}_\alpha^* = \tilde{\mathbf{w}}_\alpha^*$ and consequently $\tau_{12} = \tilde{\tau}_{12}$.

(II) The jump of specific volume, energy and entropy (5) implies that for every point $(\mathbf{w}, s^{\text{eq}}(\mathbf{w}))$ in the saturation zone we have $0 < y^* < 1$, $\tau_1^* \neq \tau_2^*$, $\varepsilon_1^* \neq \varepsilon_2^*$, $s_1^* \neq s_2^*$. Along $\tau_{12}(\mathbf{w})$, (P, T, g) are constant, then we have

$$0 = d(P/T) = s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}}(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) + s_{\tau\tau}^{\text{eq}}(\tau_1^* - \tau_2^*) \quad \text{and} \quad 0 = d(1/T) = s_{\varepsilon\varepsilon}^{\text{eq}}(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) + s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}}(\tau_1^* - \tau_2^*).$$

(III) By contradiction: let $\bar{\mathbf{w}}$ be a saturated state such that $s_{\tau\tau}^{\text{eq}}(\bar{\mathbf{w}}) = 0$. By relations (II), the Hessian matrix is null, i.e. $d^2 s^{\text{eq}}(\bar{\mathbf{w}}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$. We note $(P_\alpha, T_\alpha, g_\alpha)(\bar{\mathbf{w}}) = (\bar{P}, \bar{T}, \bar{g})$ for $\alpha = 1, 2$. We consider a regular \mathcal{C}^2 curve in \mathcal{S} parameterized by $t \in [-1, 1] \mapsto (\mathbf{w}, \gamma = s^{\text{eq}}(\mathbf{w}))(t)$ such that $\mathbf{w}(0) = \bar{\mathbf{w}}$. We have

$$\gamma''(0) = ds^{\text{eq}}(\bar{\mathbf{w}}) \frac{d^2 \mathbf{w}(0)}{dt^2} + \frac{d\mathbf{w}(0)}{dt} \frac{d^2 s^{\text{eq}}(\bar{\mathbf{w}})}{dt} = ds^{\text{eq}}(\bar{\mathbf{w}}) \frac{d^2 \mathbf{w}(0)}{dt^2}.$$

Moreover there exist \mathcal{C}^2 smooth functions $t \mapsto (y_\alpha^*, \mathbf{w}_\alpha^*)(t)$ such that

$$(\mathbf{w}, \gamma)(t) = \sum_\alpha y_\alpha^* (\mathbf{w}_\alpha^*, s_\alpha^*(\mathbf{w}_\alpha^*))(t)$$

where $y_1^* = y^*$ and $y_2^* = 1 - y^*$. We have

$$\frac{d^2 \mathbf{w}}{dt^2} = \sum_\alpha \left(\frac{d^2 y_\alpha^*}{dt^2} \mathbf{w}_\alpha^* + 2 \frac{dy_\alpha^*}{dt} \frac{d\mathbf{w}_\alpha^*}{dt} + y_\alpha^* \frac{d^2 \mathbf{w}_\alpha^*}{dt^2} \right)$$

and

$$\gamma''(t) = \sum_{\alpha} \left[\frac{d^2 y_{\alpha}^*}{dt^2} s_{\alpha}^* + 2 \frac{dy_{\alpha}^*}{dt} ds_{\alpha}^* \frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} + y_{\alpha}^* ds_{\alpha}^* \frac{d^2 \mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt^2} + y_{\alpha}^* \left(\frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} \right)^T d^2 s_{\alpha}^* \frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} \right].$$

This implies

$$\gamma''(0) = ds^{\text{eq}}(\bar{\mathbf{w}}) \frac{d^2 \mathbf{w}(0)}{dt^2} + \frac{d^2 \gamma^*}{dt^2} \left(\frac{g_1}{T_1} - \frac{g_2}{T_2} \right) + \sum_{\alpha} y_{\alpha}^* \left(\frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} \right)^T d^2 s_{\alpha}^* \frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt}$$

since

$$ds_{\alpha}^*(\mathbf{w}_{\alpha}^*(0)) = ds^{\text{eq}}(\mathbf{w}(0))(1/\bar{T}, \bar{P}/\bar{T}).$$

Consequently, as $g_{\alpha}/T_{\alpha} = \bar{g}/\bar{T}$, we have

$$\sum_{\alpha} y_{\alpha}^* \left(\frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} \right)^T d^2 s_{\alpha}^* \left(\frac{d\mathbf{w}_{\alpha}^*}{dt} \right) = 0,$$

which is impossible.

(IV) This point follows from $0 = g_1 - g_2 = (\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*) + P(\tau_1^* - \tau_2^*) - T(s_1^* - s_2^*)$. \square

Remark 1. Theorem 2.4 ensures that it is not possible to have more than one solution $(\mathbf{w}_1^*, \mathbf{w}_2^*, y^*)$, therefore existence of solution of (4) ensures uniqueness.

3. Euler system with equilibrium phase change EOS

The main result is the following theorem:

Theorem 3.1. We consider an entropy function s^{eq} as defined by Theorem 2.4 or Proposition 2.1. For smooth solutions, the one-dimensional compressible Euler system equipped with the liquid–vapor equilibrium EOS $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ reads

$$\partial_t \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ \varepsilon \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} u & \rho & 0 \\ \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial \rho} \Big|_{\varepsilon} & u & \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} \Big|_{\rho} \\ 0 & \frac{P}{\rho} & u \end{pmatrix} \partial_x \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ \varepsilon \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{with } \rho = \frac{1}{\tau}, \quad P = \frac{s_{\tau}^{\text{eq}}}{s_{\varepsilon}^{\text{eq}}}. \quad (6)$$

This system is strictly hyperbolic, i.e. it admits a complete set of real eigenvalues and eigenvectors on the cone \mathcal{C} .

Proof. The Jacobian matrix of the flux has three eigenvalues $u - c$, u , $u + c$, where c is the speed of sound given by (1). We only have to check that $c > 0$. We distinguish two regions:

Pure Phase Regions ($y \in \{0, 1\}$): $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ satisfies (2) then $c^2 > -\tau^2 T (P s_{\varepsilon\tau}^{\text{eq}} - s_{\tau\tau}^{\text{eq}})^2 / s_{\tau\tau}^{\text{eq}} \geq 0$.

Mixture Zone ($0 < y < 1$): in Theorem 2.4 we proved that $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ does not satisfies (2)-B but however we have $c^2 = -\tau^2 T (s_{\tau\varepsilon}^{\text{eq}})^2 (P + \frac{(\varepsilon_1^* - \varepsilon_2^*)}{(\tau_1^* - \tau_2^*)})^2 / s_{\tau\tau}^{\text{eq}}$ then $c^2 > 0$. \square

Corollary 3.2. The MTT-equilibrium system defined in [5], the Euler system provided with the EOS defined in [2,10,11] or defined in [12] or still defined in [14] are strictly hyperbolic.

Remark 2. We emphasize that the strict positivity of the speed of sound does not seem totally trivial. First, the function $\mathbf{w} \mapsto s^{\text{eq}}$ is concave (but not strictly concave) and its Hessian matrix is not definite negative. Concavity provides that $c \geq 0$, but we do not have a priori informations that ensures that $c > 0$. Secondly, for some systems [5–8] the loss of strict concavity of the entropy indeed leads to a zero speed of sound: in this case hyperbolicity is lost because the system eigenvalues are real but the Jacobian matrix of the flux is no longer diagonalizable. This situation leads to ill-posed problems (see, for example, [13]) where uniqueness is lost within the classical class of entropy solutions.

Remark 3. Theorem 2.4 implies that: 1) the flux function in the Euler equations is only piecewise regular. 2) The functions $\mathbf{w} \mapsto (P, T)(\mathbf{w})$ are piecewise \mathcal{C}^1 regular: their derivatives are discontinuous when the material changes

from a pure phase state to a diphasic state. 3) The function $w \mapsto c$ is piecewise \mathcal{C}^0 regular: the speed of sound is discontinuous across $y \in \{0, 1\}$ regions and $0 < y < 1$ region.

Remark 4. Explicit computations of the speed of sound for the Euler system (6) are available for the special case of two perfect gases in [1,2,10–12] when $c_{v_1} = c_{v_2} = 1$. Explicit computations are also available for the case of two stiffened gases in [14]. Let us underline that for two perfect gas EOS, namely $w_\alpha \mapsto s_\alpha = c_{v_\alpha} \log(\varepsilon_\alpha \tau_\alpha^{\gamma_\alpha - 1})$, the hypothesis of a jump of specific volume, energy and entropy across the interface (5), we used here, implies respectively that $c_{v_1}(\gamma_1 - 1) \neq c_{v_2}(\gamma_2 - 1)$, $c_{v_1} \neq c_{v_2}$ and $c_{v_1}\gamma_1 \neq c_{v_2}\gamma_2$.

4. Conclusion

We have proved the strict hyperbolicity of the compressible Euler system equipped with an EOS that describes the liquid–vapor thermodynamical equilibrium of a fluid. The proof is valid for a wide range of EOS. This result is a step towards the well-posedness study of compressible fluids systems with phase change. This work provides a solid ground for the simulation of compressible phase transition phenomena. Let us mention for example the computations of the equilibrium entropy s^{eq} for the case of two perfect gases that has been recently achieved in [9] and its extension to more general EOS that is ongoing work. This will help building general numerical solvers in the lines of [1,2,5,7,8,10,11,14].

References

- [1] T. Barberon, Modélisation mathématique et numérique de la cavitation dans des écoulements multiphasiques compressibles, Ph.D. Thesis, Université de Toulon et du Var, 2002.
- [2] T. Barberon, Ph. Helluy, Finite volume simulations of cavitating flows, *Computers and Fluids* 34 (7) (2005) 832–858.
- [3] J. Benoist, J.-B. Hiriart-Urruty, What is the subdifferential of the closed convex hull of a function?, *SIAM J. Math. Anal.* 27 (6) (1996) 1661–1679.
- [4] H.B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, second ed., John Wiley & Sons, 1985.
- [5] F. Caro, Modélisation et simulation numérique des transitions de phase liquide–vapeur, Ph.D. Thesis, École Polytechnique, 2004.
- [6] F. Caro, F. Coquel, D. Jamet, S. Kokh, DINMOD, in: S. Cordier, T. Goudon, M. Gutnic, E. Sonnerdrücker (Eds.), *Numerical Method for Hyperbolic and Kinetic Problems*, Proceedings of the CEMRACS 2003, IRMA Series in Mathematics and Theoretical Physics, 2005.
- [7] F. Caro, F. Coquel, D. Jamet, S. Kokh, Phase change simulation for isothermal compressible two-phase flows, in: *AIAA Computational Fluid Dynamics*, 2005, number AIAA-2005-4697.
- [8] F. Caro, F. Coquel, D. Jamet, S. Kokh, A simple finite-volume method for compressible isothermal two-phase flows simulation, *Int. J. Finite Volumes* (2006).
- [9] G. Faccanoni, Modélisation fine d'écoulements diphasiques : contribution à l'étude de la crise d'ébullition, Ph.D. Thesis, École Polytechnique, in preparation.
- [10] Ph. Helluy, Simulation numérique des écoulements multiphasiques : de la théorie aux applications, Thèse d'HDR, 2005.
- [11] Ph. Helluy, N. Seguin, Relaxation models of phase transition flows, *M2AN Math. Model. Numer. Anal.* 40 (2) (2006) 331–352.
- [12] S. Jaouen, Étude mathématique et numérique de stabilité pour des modèles hydrodynamiques avec transition de phase, Ph.D. Thesis, Université Paris 6, 2001.
- [13] R.J. LeVeque, *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*, Applied Mathematics, Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [14] O. Le Métayer, J. Massoni, R. Saurel, Modelling evaporation fronts with reactive Riemann solvers, *J. Comput. Phys.* 205 (2005) 567–610.

Numerical Simulation with Finite Volume of Dynamic Liquid-Vapor Phase Transition

G. Faccanoni* — S. Kokh* — G. Allaire**

* *DEN/DANS/DM2S, Commissariat à l'Énergie Atomique, Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France*

{gloria.faccanoni, samuel.kokh}@cea.fr

** *CMAP, École Polytechnique, CNRS, 91128 Palaiseau, France*

gregoire.allaire@cmap.polytechnique.fr

ABSTRACT. The present work investigates the simulation of phase transition in compressible fluids. We postulate a local and instantaneous equilibrium with respect to phasic pressures, temperatures and chemical potentials when both phases are present. This hypothesis leads to the definition of an equilibrium equation of state (EOS) for the two-phase medium. While this thermodynamical assumption is classical, there is no explicit expression of the equilibrium EOS in the general case. We propose simple means to approximate this EOS when both phases are governed by a “Stiffened Gas” EOS. Then we provide an implementation of this method within a Finite-Volume numerical scheme thanks to a two-step relaxation strategy.

KEYWORDS: phase transition, compressible flows, relaxation method

1. Introduction

The simulation of phase change phenomena that takes place in two-phase flows is an important issue that concerns many industrial applications such as the prediction of the boiling crisis for safety studies of nuclear power plants. The present work focuses on possible and simple means to deal with “Stiffened Gas” laws for simulating dynamical phase change within a Finite Volume Method framework far from the critical point. We first introduce the model examined in this paper, then we recall the basic thermodynamical tools that enable us to construct the equation of state (EOS) of the two-phase system in section 1.1 and 1.2. This EOS is implicitly defined by a non-linear system. We then present an approximate solution of this system which is valid in the case when both phases are modelled as “Stiffened Gas”. This approximation process is implemented into a numerical scheme that is presented in section 2. Finally we present numerical results in section 3.

1.1. Characterization of the two-phase media

We suppose both phases to be compressible fluids equipped with an EOS given by a function $(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \mapsto s_\alpha$ whose Hessian matrix is always negative definite and where τ_α , ε_α and s_α denote respectively the specific volume, the specific internal energy and the specific entropy of the fluid $\alpha = 1, 2$. We then define classically the temperature $T_\alpha = 1/(\partial s_\alpha / \partial \varepsilon_\alpha)_{\tau_\alpha}$, the pressure $P_\alpha = T_\alpha \cdot (\partial s_\alpha / \partial \tau_\alpha)_{\varepsilon_\alpha}$ and the chemical potential $g_\alpha = \varepsilon_\alpha + P_\alpha \tau_\alpha - T_\alpha s_\alpha$ of the fluid $\alpha = 1, 2$. Finally we note $y_1 = y$ (resp. $y_2 = 1 - y$) the mass fraction of phase 1 (resp. 2). We suppose both phases to have the same velocity \mathbf{u} .

The two-phase medium is characterized by the total density $\varrho = 1/(y\tau_1 + (1-y)\tau_2)$ and the total specific internal energy $\varepsilon = y\varepsilon_1 + (1-y)\varepsilon_2$ with $y \in [0, 1]$.

The mass transfer is modelled assuming that there is an instantaneous equilibrium at each point of the domain with respect to pressure, temperature and chemical potential between both phases. This hypothesis allows to define a new EOS $(\tau = 1/\varrho, \varepsilon) \mapsto P^{\text{eq}}$ for the medium describing the liquid-vapor thermodynamical equilibrium which will be detailed in section 1.2.

If we neglect all dissipative phenomena and local effects such as surface tension, the two-phase mixture with phase transition is governed by the compressible Euler equations with an “equilibrium EOS” denoted by $(\tau, \varepsilon) \mapsto P^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon)$:

$$\begin{cases} \partial_t \varrho + \operatorname{div}(\varrho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t(\varrho \mathbf{u}) + \operatorname{div}(\varrho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P^{\text{eq}} \operatorname{Id}) = \mathbf{0}, \\ \partial_t(\varrho \varepsilon + \varrho |\mathbf{u}|^2 / 2) + \operatorname{div}((\varrho \varepsilon + \varrho |\mathbf{u}|^2 / 2 + P^{\text{eq}}) \mathbf{u}) = 0. \end{cases} \quad [1]$$

Some mathematical properties of this system are discussed in [ALL 07, JAO 01, MEN 89, VOS 05]. We note that these equations are valid in pure phase area as well as when both phases are present. In the next section we will recall the thermodynamical construction scheme for $(\tau, \varepsilon) \mapsto P^{\text{eq}}$. Then we shall introduce simple means for approximating the equilibrium EOS that aim to deal efficiently with “Stiffened Gas”. In section 2 we shall provide a simple two-step relaxation algorithm that allows to use this approximate EOS within a Finite Volume scheme framework.

1.2. Equilibrium EOS: definition of the “Saturated States”

Let us first briefly recall the lines that allow to define the equilibrium EOS $(\tau, \varepsilon) \mapsto P^{\text{eq}}$. Under classical thermodynamical assumptions that we shall not detail here (see e.g. [CAL 85, ALL 07, HEL 05, HEL 06]) we can introduce an equilibrium entropy $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$ for the two-phase system by setting

$$s^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = \sup \left\{ \begin{array}{l} y s_1(\tau_1, \varepsilon_1) + (1-y) s_2(\tau_2, \varepsilon_2) \quad \left| \begin{array}{l} \tau = y\tau_1 + (1-y)\tau_2 \\ \varepsilon = y\varepsilon_1 + (1-y)\varepsilon_2 \\ 0 < y < 1 \end{array} \right. \end{array} \right\}$$

Then the pressure P^{eq} is defined, for given (τ, ε) , by $P^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = (\partial s^{\text{eq}} / \partial \tau)_{\varepsilon} / (\partial s^{\text{eq}} / \partial \varepsilon)_{\tau}$. When both phases are present at the equilibrium, *i.e.* when the maximizer $(\tau_1^*, \varepsilon_1^*, \tau_2^*, \varepsilon_2^*, y^*)$ of $ys_1 + (1-y)s_2$ is such that $0 < y^* < 1$, then the phases are said to be “at saturation” and the phasic variables $(\tau_1^*, \varepsilon_1^*, \tau_2^*, \varepsilon_2^*, y^*)$ can equivalently be defined (cf. [ALL 07, HEL 05, HEL 06]) as the solution of system [2] with condition [3]:

$$\begin{cases} (\tau, \varepsilon) = y(\tau_1, \varepsilon_1) + (1-y)(\tau_2, \varepsilon_2); & [2a] \\ (P_1, T_1)(\tau_1, \varepsilon_1) = (P_2, T_2)(\tau_2, \varepsilon_2), & [2b] \\ g_1(\tau_1, \varepsilon_1) = g_2(\tau_2, \varepsilon_2), & [2c] \\ y \in (0, 1). & [3] \end{cases}$$

Far from the critical point, without breaking the thermodynamical coherence, we can reasonably assume that the functions $(T_{\alpha}, P_{\alpha}) \mapsto \tau_{\alpha}$, $\alpha = 1, 2$ verify, for any $P > 0$ and $T > 0$, that $\tau_1(P, T) \geq \tau_2(P, T)$.

We now detail how to calculate in practice the pressure P^{eq} : if $(\tau_1^*, \varepsilon_1^*, \tau_2^*, \varepsilon_2^*, y^*)$ is sought as the solution of [2], we have either one of the following three possibilities:

1. if $(\tau_1^*, \varepsilon_1^*, \tau_2^*, \varepsilon_2^*, y^*)$ verifies both [2] and [3] then $\tau_2^* < \tau < \tau_1^*$, $y^* = \frac{\tau - \tau_2^*}{\tau_1^* - \tau_2^*}$ and we set $P^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = P_1(\tau_1^*, \varepsilon_1^*) = P_2(\tau_2^*, \varepsilon_2^*)$,
2. otherwise
 - (a) if $s_1(\tau, \varepsilon) > s_2(\tau, \varepsilon)$ then we set $y^* = 1$ and $P^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = P_1(\tau, \varepsilon)$,
 - (b) if $s_1(\tau, \varepsilon) < s_2(\tau, \varepsilon)$ then we set $y^* = 0$ and $P^{\text{eq}}(\tau, \varepsilon) = P_2(\tau, \varepsilon)$.

In the first case, we have a uniquely defined equilibrium state between both phases and $(\tau_1^*, \varepsilon_1^*, \tau_2^*, \varepsilon_2^*, y^*)$ can be parametrized¹ by a single thermodynamical variable P or T . This result is classical [CAL 85] and allows us to define the coexistence curve $T \mapsto P = P^{\text{sat}}(T)$. The last two cases correspond to a pure phase $\alpha = 1$ or $\alpha = 2$ state and the system [2] has therefore no solution or condition [3] fails.

Unfortunately, in the general case the strong non-linearity of system [2]-[3] can seriously affect its numerical resolution. Therefore we propose a strategy to approximate its possible solution. First we note that solving [2] is equivalent to seeking (T, P) such that

$$\frac{\tau - \tau_2(P, T)}{\tau_1(P, T) - \tau_2(P, T)} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_2(P, T)}{\varepsilon_1(P, T) - \varepsilon_2(P, T)}, \quad T \mapsto P = P^{\text{sat}}(T). \quad [4]$$

We then consider the following alternative strategy: instead of [4] we impose the variable T to verify

$$\frac{\tau - \tau_2(P, T)}{\tau_1(P, T) - \tau_2(P, T)} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_2(P, T)}{\varepsilon_1(P, T) - \varepsilon_2(P, T)}, \quad T \mapsto P = \hat{P}^{\text{sat}}(T), \quad [5]$$

1. Relations [2b] allow us to write volumes τ_{α} and internal energies ε_{α} as functions of the same pressure P and temperature T . Then from relations [2a] we find that y is a function of P and T and finally we find that solving the system [2] is equivalent to seeking (T, P) such that

$$\frac{\tau - \tau_2(P, T)}{\tau_1(P, T) - \tau_2(P, T)} = \frac{\varepsilon - \varepsilon_2(P, T)}{\varepsilon_1(P, T) - \varepsilon_2(P, T)}, \quad g_1(P, T) = g_2(P, T).$$

Phase	c_v [J/(kg · K)]	γ	π [Pa]	q [J/kg]	m [J/(kg · K)]
Liquid	1816.2	2.35	10^9	-1167.056×10^3	-32765.55596
Vapor	1040.14	1.43	0	2030.255×10^3	-33265.65947

Table 1. Parameters for water and steam with a “Stiffened Gas” EOS.

where $T \mapsto \hat{P}^{\text{sat}}$ is a simple and convenient approximation for $T \mapsto P^{\text{sat}}$. For example, given a set of points $\mathfrak{A} = \{(T^i, P^{\text{sat}}(T^i))\}_i$, we can define \hat{P}^{sat} thanks to a least square approximation of \mathfrak{A} .

In the sequel we consider both phases to be governed by a “Stiffened Gas” EOS: $(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \mapsto s_\alpha = c_{v_\alpha} \ln(\varepsilon_\alpha - q_\alpha - \pi_\alpha \tau_\alpha) + c_{v_\alpha}(\gamma_\alpha - 1) \ln \tau_\alpha + m_\alpha$ where the constants $c_{v_\alpha} > 0$, $\gamma_\alpha > 1$, π_α and m_α are coefficients that describe the thermodynamical properties of the phase $\alpha = 1, 2$. According to the definition we have

$$(P, T) \mapsto \varepsilon_\alpha = c_{v_\alpha} T \frac{P + \pi_\alpha \gamma_\alpha}{P + \pi_\alpha} + q_\alpha, \quad (P, T) \mapsto \tau_\alpha = c_{v_\alpha}(\gamma_\alpha - 1) \frac{T}{P + \pi_\alpha}. \quad [6]$$

If $q_\alpha \neq 0$ for at least one α , we did not find any explicit expression for the coexistence curve.

We provide below an example function $T \mapsto \hat{P}^{\text{sat}}$ for water. The “Stiffened Gas” parameters c_{v_α} , γ_α , π_α and m_α (displayed in Table 1) are those proposed by [LEM 04]. We consider the set of points $\mathfrak{A} = \{(T^i = 278 + 4i, P^{\text{sat}}(T^i))\}_{i=0}^{83}$ where temperature and pressure are expressed in SI units. The value $P^{\text{sat}}(T^i)$ is calculated by solving numerically $g_1(P, T^i) = g_2(P, T^i)$. In this particular case, we chose to seek for $T \mapsto \ln(\hat{P}^{\text{sat}})$ as a polynomial. We obtained good approximation results with a 8th degree polynomial that led us to set the following approximation

$$T \mapsto \hat{P}^{\text{sat}} = \exp\left(\sum_{k=0}^8 a_k T^k\right) \quad [7]$$

with

$$\begin{array}{lll} a_0 = -110.562041 & a_1 = 1.411518 & a_2 = -0.808758 \times 10^{-2} \\ a_3 = 0.290760 \times 10^{-4} & a_4 = -0.687431 \times 10^{-7} & a_5 = 0.107095 \times 10^{-9} \\ a_6 = -0.106089 \times 10^{-12} & a_7 = 0.606689 \times 10^{-16} & a_8 = -0.152683 \times 10^{-19} \end{array}$$

Finally, given (τ, ε) , we propose to calculating the pressure value of the equilibrium EOS by solving system [5] thanks to a fixed point algorithm, where $T \mapsto \hat{P}^{\text{sat}}$ is given by [7] (see Figure 1).

In order to check the accuracy of this strategy, we consider a sequence of states $\{(\tau, \varepsilon)^{i,j}\}_{i,j}$ calculated as follows: let $(T^i = 278 + 4i)_{i=0}^{83}$, $(y^j = j/15)_{j=0}^{15}$; let $(\tilde{\tau}_\alpha, \tilde{\varepsilon}_\alpha)^{i,j}$ be the approximated solution of the system $(P, T, g)_1(\tau_1, \varepsilon_1) = (P, T, g)_2(\tau_2, \varepsilon_2)$ provided by Maple with the function `fsolve` (with 40 digits precision) and where $(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha)^{i,j}$ verify [6]; we set $(\tau, \varepsilon)^{i,j} = y^j(\tilde{\tau}_1, \tilde{\varepsilon}_1)^{i,j} + (1 - y^j)(\tilde{\tau}_2, \tilde{\varepsilon}_2)^{i,j}$. Let $(\hat{T}^{i,j}, \hat{y}^{i,j})$ be the approximated solution of [5] associated with $(\tau, \varepsilon)^{i,j}$ obtained by Maple with the function `fsolve`. We obtain

$$\max_{0 \leq i \leq 83} |P^{\text{sat}}(T^i) - \hat{P}^{\text{sat}}(T^i)| < 67.2 \text{ Pa}, \quad \max_{0 \leq i \leq 83} \frac{|P^{\text{sat}}(T^i) - \hat{P}^{\text{sat}}(T^i)|}{P^{\text{sat}}(T^i)} < 1.8 \times 10^{-5},$$

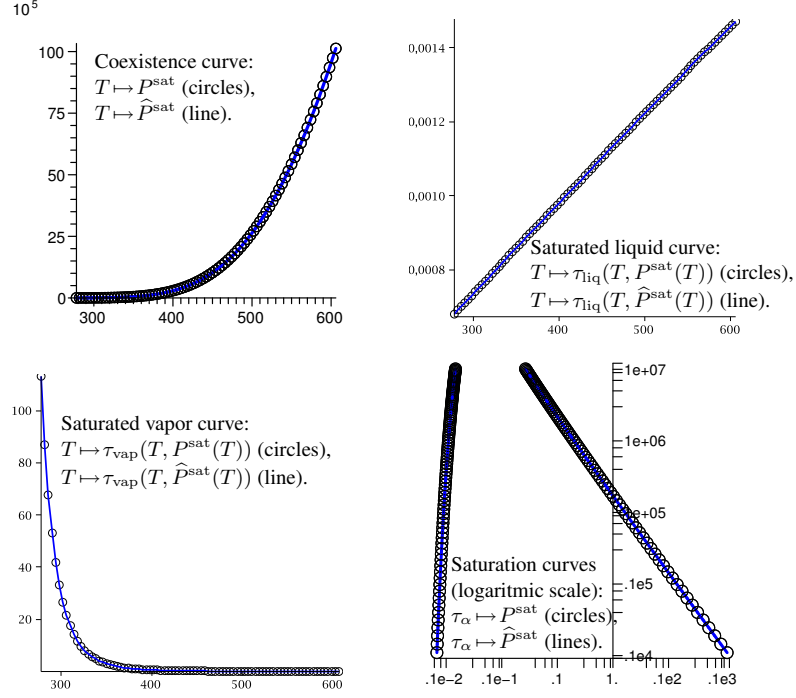


Figure 1. Exact (circles) and approximate (lines) pressure and volumes at saturation as functions of temperature and saturation dome.

$$\max_{\substack{0 \leq i \leq 83 \\ 0 \leq j \leq 15}} |T^i - \hat{T}^{i,j}| < 1.2 \times 10^{-3} \text{ K}, \quad \max_{\substack{0 \leq i \leq 83 \\ 0 \leq j \leq 15}} \frac{|T^i - \hat{T}^{i,j}|}{T^i} < 2.4 \times 10^{-6},$$

$$\max_{\substack{0 \leq i \leq 83 \\ 0 \leq j \leq 15}} |y^j - \hat{y}^{i,j}| < 1.9 \times 10^{-6}.$$

This allows us to check that the thermodynamical values associated with the saturated states are recovered with a good accuracy by approximation [5] (see Figure 1).

2. Numerical Method

We propose in this section a two-step relaxation method that aims to simulate system [1] following similar lines as in [HEL 06, CAR 06]. We consider below the augmented system that is a relaxed version of [1]:

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{W} + \text{div} \mathbf{F}(\mathbf{W}, z) = \mathbf{R}(\mathbf{W}, z) \\ \partial_t z + \mathbf{u} \cdot \text{grad} z = Q(\mathbf{W}, z) \end{cases} \quad [8]$$

where

$$\begin{aligned}\mathbf{W} &= (z\varrho_1, (1-z)\varrho_2, \varrho\mathbf{u}, \varrho(\varepsilon + |\mathbf{u}|^2/2)), \\ \mathbf{F}(\mathbf{W}, z) &= (z\varrho_1\mathbf{u}, (1-z)\varrho_2\mathbf{u}, \varrho\mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \text{Id}, (\varrho(\varepsilon + |\mathbf{u}|^2/2) + P)\mathbf{u}), \\ \mathbf{R}(\mathbf{W}, z) &= (\mu(g_2/T_2 - g_1/T_1), -\mu(g_2/T_2 - g_1/T_1), 0, 0), \\ Q(\mathbf{W}, z) &= \nu(P_1/T_1 - P_2/T_2),\end{aligned}$$

with the volume fraction z such that $\varrho = z\varrho_1 + (1-z)\varrho_2$, $P = zP_1 + (1-z)P_2$ and the closure $T_1 = T_2$.

Formally the equilibrium $\mu, \nu \rightarrow +\infty$ implies that $\mathbf{R}(\mathbf{W}, z) = \mathbf{0}$, $Q(\mathbf{W}, z) = 0$ which matches equilibrium relations [2]. We implement the following numerical strategy for approximating [1].

Step I: let $(\mathbf{W}, z)^n$ be the state variables of system [8] at $t = t^n$. The augmented variable $(\mathbf{W}, z)^n$ is updated to $(\mathbf{W}, z)^{n+1/2}$ by solving the system [8] with $\mathbf{R}(\mathbf{W}, z) = \mathbf{0}$, $Q(\mathbf{W}, z) = 0$. In our tests this step is achieved thanks to a Finite Volume Roe-like solver proposed in [ALL 02];

Step II: perform an approximated projection of the state $(\mathbf{W}, z)^{n+1/2}$ onto the equilibrium defined by $\mu, \nu \rightarrow +\infty$ by approaching the solution of $\mathbf{R}(\mathbf{W}, z) = \mathbf{0}$, $Q(\mathbf{W}, z) = 0$. This step is achieved by seeking the solution (\hat{T}, \hat{y}) of the system [5], thanks to a dichotomy algorithm. We then set

$$T^{n+1} = \hat{T}, \quad P^{n+1} = \hat{P}^{\text{sat}}(T^{n+1}), \quad y^{n+1} = \hat{y}$$

and

$$(\varrho, \mathbf{u}, \varepsilon)^{n+1} = (\varrho, \mathbf{u}, \varepsilon)^{n+1/2}, \quad z^{n+1} = \begin{cases} 0 & \text{if } y^{n+1} = 0 \\ y^{n+1}\varrho^{n+1}\tau_1^{n+1} & \text{if } 0 < y^{n+1} < 1 \\ 1 & \text{if } y^{n+1} = 1 \end{cases}$$

which defines $(\mathbf{W}, z)^{n+1}$.

Let us note that although the pressure P^{eq} is \mathcal{C}^0 regular but merely piecewise \mathcal{C}^1 regular, the two-step relaxation method did not generate spurious oscillations in the solutions of our tests.

3. Numerical Test: Compression of a Vapor Bubble

Our method is tested on the case of a vapor bubble compression (see Figure 2). We consider a 1 m side-length 2D square domain discretized over a 300×300 cell mesh. A water vapor bubble is surrounded by liquid water in the center of the domain. The radius is initially $r = 0.2$ m. Both EOS used are ‘‘Stiffened Gas’’ type whose coefficients are given in Table 1. The initial temperature is fixed to $T_0 = 439$ K and the fluid is initially at rest ($\mathbf{u} = \mathbf{0}$) in the whole domain. Both phases are supposed to be at saturation at $t = 0$, therefore the densities for the liquid ϱ_{liq} and the vapor

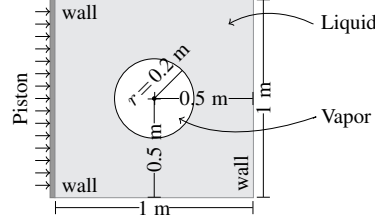


Figure 2. Geometry of test “Compression of a Vapor Bubble”

ρ_{vap} are $\rho_{\text{liq}} = 929.7941874 \text{ kg/m}^3$, $\rho_{\text{vap}} = 4.091902657 \text{ kg/m}^3$, while the pressure is $P = P^{\text{sat}}(T_0) = 8.034337432 \times 10^5 \text{ Pa}$ for both phases. We suppose the left boundary to be a piston that moves towards right at constant speed by imposing a constant velocity $u_p = 30 \text{ m/s}$ in the fictitious cells. Other boundary conditions are reflective walls. Figure 3 shows the mass fraction y for time varying from $t = 0 \text{ ms}$ to $t = 3.30 \text{ ms}$. The moving piston generates a pressure wave that compresses the vapor. As the pressure increases the vapor starts to condensate and the bubble shrinks.

4. Conclusion and Perspectives

In this paper we have examined a dynamical phase-change model for compressible flows. This model relies on a classical thermodynamical hypothesis of equilibrium between both phases. We introduced a simple process for approximating the computation of this equilibrium in the case both phases are modelled with “Stiffened Gas”. We also proposed an implementation of this method coupled to a Finite Volume numerical solver within a two-step relaxation strategy.

When we deal with more realistic EOS, the resolution of system [2] that determines the equilibrium between both phases may be more arduous because the experimental data $(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \mapsto (P_\alpha, T_\alpha, g_\alpha)$ for the pure phase $\alpha = 1, 2$ are not available for every point $(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha)$, therefore the pure phase EOS may be only partially defined. In this case we should propose an alternative approximation for [4] that circumvents this difficulty. Further investigations in order to achieve this task are already in progress.

5. References

- [ALL 02] ALLAIRE G., CLERC S., KOKH S., “A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids”, *J. Comput. Phys.*, vol. 181, num. 2, 2002, p. 577–616.
- [ALL 07] ALLAIRE G., FACCANONI G., KOKH S., “A Strictly Hyperbolic Equilibrium Phase Transition Model”, *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I*, vol. 344, 2007, p. 135–140.
- [CAL 85] CALLEN H. B., *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, John Wiley & Sons, second edition, 1985.

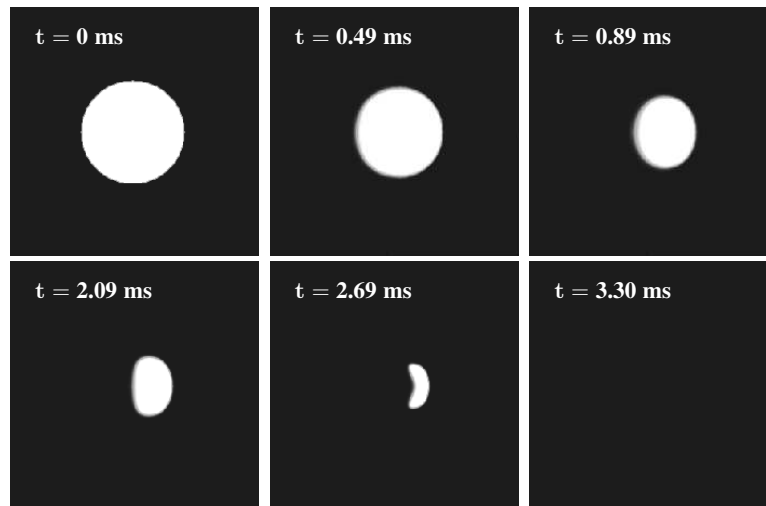


Figure 3. Mass fraction profile.

- [CAR 06] CARO F., COQUEL F., JAMET D., KOKH S., “A Simple Finite-Volume Method for Compressible Isothermal Two-Phase Flows Simulation”, *Int. J. on Finite Volumes*, vol. 3, num. 1, 2006, p. 1–37.
- [HEL 05] HELLUY P., “Quelques exemples de méthodes numériques récentes pour le calcul des écoulements multiphasiques.”, Mémoire d’habilitation à diriger des recherches, 2005.
- [HEL 06] HELLUY P., SEGUIN N., “Relaxation model of phase transition flows”, *M2AN, Math. Model. Numer. Anal.*, vol. 40, num. 2, 2006, p. 331–352.
- [JAO 01] JAOUEN S., “Étude mathématique et numérique de stabilité pour des modèles hydrodynamiques avec transition de phase”, PhD thesis, Univ. Paris 6, France, 22 November 2001.
- [LEM 04] LE METAYER O., MASSONI J., SAUREL R., “Elaborating equations of state of a liquid and its vapor for two-phase flow models”, *Int. J. of Th. Sci.*, vol. 43, num. 3, 2004, p. 265–276.
- [MEN 89] MENIKOFF R., PLOHR B., “The Riemann Problem for Fluid Flow of Real Materials”, *Reviews of Modern Physics*, vol. 61, num. 1, 1989, p. 75–130, APS.
- [VOS 05] VOSS A., “Exact Riemann Solution for the Euler Equations with Nonconvex and Non-smooth Equation of State”, PhD thesis, Rheinisch-Westfälischen, 21 January 2005.

6. Acknowledgements

This work has been achieved within the framework of the NEPTUNE project, financially supported by CEA (Commissariat à l’Énergie Atomique), EDF (Électricité de France), IRSN (Institut de Radioprotection et de Sécurité Nucléaire) and AREVA-NP.

PARTE IV.

RIASSUNTO (IN ITALIANO)

Studio di un modello fine di cambiamento di fase liquido-vapore. Contribuzione allo studio della crisi d'ebollizione.

La tesi è costituita da un'introduzione seguita da nove capitoli e dalla conclusione. Sei capitoli (2-7) sono dedicati alla modellizzazione del cambiamento di fase. Due (8-9) presentano le tecniche numeriche utilizzate per l'approssimazione di tale modello. Il capitolo 10 raccoglie i risultati delle simulazioni numeriche.

CONTESTO La tesi si occupa della modellizzazione e della simulazione del movimento di fluidi bifase seno di transizioni liquido-vapore. I trasferimenti di calore in regime d'ebollizione sono molto efficaci. Questo spiega il fatto che il cambiamento di fase liquido-vapore sia uno dei mezzi più utilizzati nell'industria per trasferire il calore e raffreddare di conseguenza delle pareti calde. Le applicazioni sono molto varie: si va dal raffreddamento dei cuori dei reattori nelle centrali nucleari di tipo PWR (reattori ad acqua pressurizzata) o BWR (reattori ad acqua bollente) a tutti gli scambiatori di calore ad esempio. Una buona conoscenza del fenomeno dell'ebollizione è altresì necessaria per lo studio dei combustibili liquidi contenuti nei serbatoi dei vettori per il lancio dei satelliti nello spazio.

Nella tesi il contesto è quello dell'industria nucleare civile, in particolare lo studio dell'ebollizione nei reattori nucleari ad acqua pressurizzata. Durante il funzionamento nominale, l'acqua del circuito primario si trova allo stato liquido ad un regime di circa 150 bar in pressione per una temperatura di circa 300 °C. Tuttavia, uno scenario di studio classico per le autorità di sicurezza francesi nell'ambito del nucleare consiste nello studiare un possibile incidente in questo circuito (ad esempio in caso di problemi al pressurizzatore o di fessurazione del circuito primario o di eiezione di una barra di controllo dal cuore). In tal caso abbiamo la cosiddetta *crisi d'ebollizione*.

FENOMENO La crisi d'ebollizione è il passaggio da un regime d'ebollizione a nuclei a un regime d'ebollizione in film ed è un fenomeno fisico locale ma che può avere conseguenze macroscopiche devastanti. Infatti questo passaggio comporta la formazione di

uno strato di vapore, cattivo conduttore del calore, intorno alle barre contenenti il combustibile nucleare. Tali barre si trovano così isolate dall'acqua di raffreddamento da un film di vapore che blocca il trasferimento del calore. Si ha allora un brutale aumento della temperatura delle barre che conduce alla loro distruzione quasi istantanea e che può portare alla fusione del cuore del reattore.

Nonostante il carattere banale dell'ebollizione, che possiamo facilmente osservare quotidianamente, i meccanismi fisici locali che ne sono alla base restano ancora relativamente poco chiari, soprattutto a scala microscopica che è quella più importante per le applicazioni. È il caso in particolare a forte flusso di calore imposto alla parete dove, come detto sopra, la creazione di un film di vapore può condurre alla distruzione della parete stessa. Questo rischio, potenzialmente distruttore delle installazioni industriali (e nel caso di un reattore può causare la fusione del cuore stesso), è attualmente controllato basandosi su delle correlazioni sperimentali. Tuttavia il ricorso all'esperienza è fortemente limitato poiché il fenomeno è repentino e molto violento. È dunque necessario sviluppare altre strategie per meglio comprendere il fenomeno. È in questo contesto che abbiamo deciso di utilizzare la *simulazione numerica diretta*: descrivendo il movimento di ciascuna bolla di vapore nel liquido, essa permette di studiare i meccanismi dell'ebollizione ad una scala microscopica.

Nell'ottica di realizzare delle simulazioni numeriche della dinamica della crisi d'ebollizione, questa tesi verte sullo sviluppo, l'analisi e le prime risoluzioni numeriche di un modello "fine" che descrive l'evoluzione di un fluido soggetto a cambiamenti di fase liquido-vapore.

MODELLO Il sistema di equazioni alle derivate parziali che descrive l'evoluzione del fluido corrisponde alle equazioni di Eulero. Questo sistema è poi chiuso da un'unica legge di stato (EOS) che permette di descrivere le due fasi pure del fluido (stato liquido e stato gassoso) ma anche la transizione di fase tra le due fasi.

Abbiamo adottato un approccio di tipo "interfaccia diffusa" che modella le interfacce separanti il liquido dal vapore come delle regioni di spessore non nullo attraverso le quali le grandezze fisiche del fluido variano fortemente ma con continuità.

Abbiamo quindi ipotizzato che le leggi di stato delle due fasi pure siano conosciute analiticamente sotto forma di un'entropia funzione del volume e dell'energia interna molari e che verificano le usuali proprietà termodinamiche. La legge di stato che modella il cambiamento di fase, costruita al capitolo 2, è allora ottenuta attraverso la massimizzazione dell'entropia fisica del miscuglio delle due fasi.

Da un punto di vista pratico, questa costruzione conduce alla ricerca di un equilibrio isoterma-isobaro-equipotenziiale tra le fasi pure e dunque alla ricerca di una coppia pressione-temperature (P, T) che verifica due equazioni non lineari aventi queste due incognite. La prima equazione si interpreta come la curva di coesistenza, la seconda come l'equazione del cambiamento di fase.

È noto che questa legge di stato è in parte degenerata nel senso che l'entropia così definita ha matrice hessiana definita negativa ma non strettamente negativa (la superficie associata è in effetti concava ma non strettamente concava). Questo può costituire un problema poiché la stretta negatività della matrice hessiana dell'entropia è la condizione sufficiente usuale che assicura che il sistema d'Eulero è strettamente iperbolico (quest'ultima proprietà è necessaria per la risoluzione teorica e numerica delle equazioni). Sebbene le velocità caratteristiche (cioè gli autovalori della matrice jacobiana) siano reali, non era ancora stato dimostrato se la velocità del suono era non nulla, condizione che implica l'esistenza di una base di autovettori reali e dunque la stretta iperbolicità del sistema. Al capitolo 3 (tratto da Allaire *et al.* [2]) abbiamo

dimostrato che, con delle ipotesi generiche soddisfatte dalla maggior parte dei fluidi (fra cui l'acqua), il sistema di Eulero bifase con cambiamento di fase è effettivamente iperbolico. Tuttavia la velocità del suono è discontinua quando attraversa la curva di saturazione (in particolare, è più piccola nel “miscuglio” che in ciascuna delle fasi pure).

Dopo aver dimostrato la stretta iperbolicità del sistema delle equazioni di Eulero munito di questa legge di stato, abbiamo analizzato la questione dell'esistenza e dell'unicità delle soluzioni del problema di Riemann. Per questo abbiamo studiato in dettaglio il profilo delle curve isentropiche che risultano solo di classe \mathcal{C}^1 a tratti e che perdono di convessità lungo la curva di rosée (ramo della curva di saturazione a destra del punto critico). Questa anomalia è dovuta alla discontinuità della velocità del suono. È noto (vedere ad esempio [58, 80, 96]) che in tal caso esiste più di una soluzione entropica. È tuttavia ancora possibile risolvere il problema di Riemann in modo unico grazie al criterio entropico di Liu [58, 96].

METODO NUMERICO La risoluzione numerica di questo sistema resta tuttavia piuttosto complicata all'atto pratico sempre a causa della discontinuità della velocità del suono. Per ovviare a questo problema abbiamo allora deciso di adottare un approccio di tipo “rilassamento” [27]. Il sistema delle equazioni di Eulero con cambiamento di fase può allora essere ottenuto come limite di rilassamento di un sovra-sistema (a sei equazioni o a cinque equazioni con chiusura isoterma) contenente dei termini sorgente di rilassamento: quando i tempi caratteristici della transizione di fase tendono a zero, il sovra-sistema tende all'equilibrio termodinamico (cf. [48]) modellizzando in questo modo il cambiamento di fase. Questi termini sorgente coincidono con le condizioni di ottimalità della massimizzazione dell'entropia fisica del miscuglio e questo problema è altresì equivalente a un'operazione classica in ottimizzazione detta inf-convoluzione [46].

ALGORITMO L'approssimazione numerica basata su questo approccio è realizzata attraverso una decomposizione di operatori. Ogni passo temporale è diviso in due tappe: un passo idrodinamico senza termini di rilassamento seguito dal rilassamento delle quantità termodinamiche attraverso la massimizzazione dell'entropia.

Concretamente,

- ❶ inizialmente risolviamo il modello a cinque equazioni con chiusura isoterma, cioè senza i termini sorgente di cambiamento di fase, con un metodo ai volumi finiti in cui i flussi numerici sono calcolati grazie all'algoritmo approssimato di tipo Roe introdotto in [1];
- ❷ nella seconda parte prendiamo in considerazione i termini sorgente di cambiamento di fase proiettando la soluzione sulla varietà d'equilibrio. In altre parole, conoscendo le variabili termodinamiche, massimizziamo l'entropia globale e otteniamo così dei nuovi valori delle concentrazioni delle fasi.

Per simulare la nucleazione di una bolla di vapore in contatto con una parete riscaldata abbiamo introdotto inoltre la diffusione del calore, la gravità e la tensione superficiale che sono prese in considerazione durante la prima tappa.

Tappa di proiezione In [35] abbiamo dimostrato che la massimizzazione dell'entropia, ossia la risoluzione della seconda tappa dell'algoritmo, è teoricamente equivalente alla risoluzione (in generale numerica) di un'equazione non lineare detta "equazione del cambiamento di fase". Abbiamo inoltre dimostrato che tale soluzione esiste ed è unica.

Nel caso di leggi di stato semplici (come ad esempio per i gas perfetti), possiamo scrivere esplicitamente quest'equazione (cf. capitolo 5).

Per leggi di stato più ricche, come la legge di stato di tipo *Stiffened Gas*, le cose si complicano: l'equazione del cambiamento di fase è definita solo implicitamente da un sistema di due equazioni non-lineari. Purtroppo la risoluzione di questo sistema comporta dei problemi di convergenza ma soprattutto di velocità dell'algoritmo. Per questo motivo abbiamo allora proposto una strategia di risoluzione basata su un'approssimazione nel senso dei minimi quadrati della curva di coesistenza (cf. [35] e capitolo 6). Questa tecnica fornisce una versione approssimata dell'equazione del cambiamento di fase.

Abbiamo infine esteso questa procedura al caso di leggi di stato qualunque, in particolare alle leggi di stato tabulate provenienti dalle tavole sperimentali (cf. capitolo 7).

Abbiamo pertanto una strategia molto generale per la simulazione del cambiamento di fase in cui la tappa di massimizzazione dell'entropia può essere realizzata numericamente, una volta per tutte, prima di fare delle simulazioni numeriche del movimento del fluido.

VALIDAZIONE Il capitolo 10 illustra una serie di test numerici mono e bidimensionali di cambiamento di fase per variazioni di pressione e/o di temperatura. Le simulazioni effettuate mettono in evidenza un certo numero di vantaggi del modello e del metodo di rilassamento: a un costo computazionale modesto, questo approccio permette di catturare su una mesh euleriana dei fronti dalla topologia complessa e cambiante e gestisce facilmente le transizioni di fase in un quadro puramente compressibile e senza localizzazione precisa dell'interfaccia.

Étude d'un modèle fin de changement de phase liquide-vapeur. Contribution à l'étude de la crise d'ébullition.

Cette thèse étudie la modélisation et la simulation numérique d'écoulements diphasiques à interfaces avec changement de phase. Cette transition est localisée en des interfaces qui sont produites dynamiquement. On prend également en compte la diffusion de la chaleur, la tension de surface et les forces de gravité. L'application envisagée est la simulation d'écoulements dans un réacteur à eau pressurisée dans l'industrie nucléaire civile. On s'intéresse ici plus précisément à un éventuel fonctionnement accidentel et en particulier au phénomène de la crise d'ébullition. On modélise les écoulements diphasiques avec changement de phase par un modèle basé sur le système des équations d'Euler fermé par une seule équation d'état obtenue en postulant un équilibre instantané et local des pressions, températures et potentiels chimiques de chaque phase. On en étudie ensuite l'hyperbolicité et le problème de Riemann qui lui est associé. Du point de vue numérique, puisqu'il n'y a pas d'expression analytique pour la loi à l'équilibre dans le cas général, on propose une méthode simple pour approcher cette loi d'état lorsque les propriétés des deux phases sont décrites par des lois très générales, éventuellement sous forme tabulée. Enfin, pour simuler des écoulements diphasiques avec changement de phase, on présente un schéma numérique de type relaxation/projection pour lequel la phase de projection utilise cette approximation de l'équilibre thermodynamique.

Mots clés : écoulements diphasiques compressibles, changement de phase liquide-vapeur, hyperbolicité, relaxation, méthode de volumes-finis

Study of a Fine Model of Liquid-Vapor Phase Change. Contribution to the Boiling Crisis Study.

This thesis studies the modelling and the numerical simulation of two-phase flows with interfaces and phase change. This transition occurs through interfaces that are generated dynamically. We also take into account the heat diffusion, the surface tension and the gravity forces. The context is the simulation of two-phase flows in a pressurized water reactor in the civil nuclear industry. We are interested here specifically in potential accidents and in particular in the boiling crisis. Two-phase flows with phase change are modeled by the Euler system closed by a single equation of state (EOS) obtained assuming local and instantaneous equilibrium with respect to pressure, temperature and chemical potential of each phase. We next prove the hyperbolicity of the system and study its Riemann problem. From a numerical point of view, since there is no explicit expression of the equilibrium EOS in the general case, we propose simple means to approximate this EOS when both phases are governed by any type of EOS, including tabulated ones. Finally, we present a relaxation/projection type numerical scheme based on this approximation of the equilibrium EOS for simulating two-phase flows with phase change.

Keywords: compressible flow, liquid-vapor phase change, hyperbolicity, relaxation, finite-volume method

École Polytechnique, Università di Trento et CEA Saclay